Fondamenti Matematici del
Trasporto Ottimale

dalla Teoria di Monge–Kantorovich
alla Geometria degli Spazi di Wasserstein

Saggio di Analisi Matematica

Prefazione

La teoria del trasporto ottimale è una delle costruzioni matematiche più ricche e poliedriche sorte nel corso del ventesimo secolo, capace di connettere in modo sorprendentemente naturale la geometria differenziale, l'analisi funzionale, la teoria delle equazioni alle derivate parziali, il calcolo delle variazioni e, in anni più recenti, la statistica computazionale e l'apprendimento automatico. Nata come problema di ingegneria militare nella mente di Gaspard Monge nel 1781, dimenticata e poi riscoperta in un contesto di pianificazione economica da Leonid Kantorovich nel 1942, sviluppata in tutta la sua profondità geometrica dalla scuola francese e americana degli anni 1980–2010, la teoria del trasporto ottimale rappresenta oggi un capitolo imprescindibile della matematica contemporanea.

La presente monografia si propone di esporre in modo rigoroso e autocontenuto i fondamenti matematici di questa teoria, con particolare attenzione alla struttura geometrica degli spazi di Wasserstein, alla teoria della regolarità dell'equazione di Monge–Ampère, alla regolarizzazione entropica e alle sue applicazioni computazionali, e ai legami con la teoria dei flussi gradiente in spazi metrici. L'esposizione è concepita per un lettore che abbia già familiarità con la misura e l'integrazione astratta, l'analisi funzionale di base e gli elementi di topologia generale, ma che non presuppone conoscenze specialistiche di geometria differenziale o di teoria delle equazioni alle derivate parziali nonlineari: questi strumenti vengono sviluppati nella misura necessaria in seno alla trattazione stessa.

La struttura del testo si articola in sei parti. La prima parte, composta dai capitoli 1–3, costruisce l'architettura misurabile e probabilistica di base: gli spazi polacchi, la convergenza stretta, il teorema di Prokhorov, il teorema di disintegrazione di Rokhlin, il problema di Monge nella sua formulazione originale e il rilassamento di Kantorovich con la sua dualità. La seconda parte, corrispondente ai capitoli 4 e 5, studia la geometria degli spazi di Wasserstein, dimostrando le proprietà metriche della distanza W_p, la struttura geodetica di $(\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n), W_2)$ tramite il teorema di interpolazione per spostamento di McCann, la formula di Benamou–Brenier e il calcolo riemanniano formale di Otto. La terza parte, articolata nel capitolo 6, affronta l'equazione di Monge–Ampère, derivandola dal problema di trasporto e presentando la teoria della regolarità di Caffarelli con le sue stime sulle sezioni. La quarta parte, articolata nei capitoli 7–9, tratta la regolarizzazione entropica e il problema di Schrödinger, lo schema JKO, i modelli di diffusione e la convessità displacement con le disuguaglianze funzionali che essa implica. La quinta parte, composta dai capitoli 10 e 11, approfondisce la struttura ellittica dell'equazione di Monge–Ampère: il principio di Aleksandrov–Bakel'man–Pucci, la teoria di Schauder linearizzata, e i dettagli quantitativi della regolarità di Caffarelli con stime globali. La sesta parte, formata dai capitoli 12 e 13, sviluppa la teoria avanzata dell'algoritmo di Sinkhorn — complessità campionaria, epsilon-scaling e trasporto non bilanciato — e le applicazioni ai modelli generativi profondi: score matching, Flow Matching, Rectified Flow, adattamento di dominio e trasporto ottimale neurale. La settima parte comprende i capitoli 14 (Baricentri di Wasserstein e Trasporto Multi-Marginale) e 15

(Distanza di Gromov–Wasserstein). Conclude la monografia la parte ottava che tratta della curvatura e sintesi di Ricci con la teoria di Lott–Villani–Sturm (capitolo 16) e, infine, le Statistiche del Trasporto Ottimale (Capitolo 17).

Sul piano della notazione, si è scelto di adottare uno stile il più possibile uniforme e coerente, privilegiando la chiarezza rispetto all'economia di simboli. Le variabili di integrazione e i punti degli spazi vengono sempre esplicitati; le dipendenze funzionali vengono indicate esplicitamente laddove la loro omissione potrebbe ingenerare ambiguità. Un'appendice finale raccoglie le principali notazioni e convenzioni adottate, cui il lettore può fare riferimento in qualsiasi momento della lettura.

Un avvertimento di natura epistemica si impone. La teoria del trasporto ottimale è un campo in rapidissima evoluzione, e la letteratura che vi è dedicata è ormai vastissima. La presente monografia non pretende di essere esauriente: si concentra sui risultati fondamentali e sulle tecniche di dimostrazione che li sostanziano, tralasciando sviluppi importanti — come la teoria delle geodetiche in spazi di Alexandrov, il trasporto ottimale in spazi di misura non commutativa, le varianti unilaterali e parziali del problema di Kantorovich, e la teoria dei trasporti multi-marginali — che avrebbero richiesto un'estensione sproporzionata del testo. Per ciascuno di tali sviluppi vengono segnalate, nelle note bibliografiche, le referenze primarie.

PARTE I

Fondamenti di Teoria della Misura e degli Spazi di Probabilità

Capitolo 1 — Spazi Polacchi, Misure di Borel e Convergenza Stretta

Il punto di partenza naturale per qualsiasi trattazione rigorosa del trasporto ottimale è la costruzione di un'architettura misurabile sufficientemente flessibile da contenere tanto la geometria degli spazi euclidei quanto quella di spazi funzionali infinito-dimensionali. L'ambito corretto è quello degli spazi metrici completi e separabili, denominati spazi polacchi in omaggio alla scuola di Varsavia che ne sviluppò la teoria nella prima metà del Novecento. La ricchezza strutturale di questi spazi — completezza e separabilità — si riflette in proprietà straordinariamente utili delle misure di probabilità definite su di essi: il criterio di compattezza di Prokhorov, il teorema di disintegrazione di Rokhlin, il teorema di Lusin sull'approssimazione boreliana e il teorema di Tietze sull'estensione di funzioni continue. Ciascuno di questi risultati è uno strumento indispensabile nell'analisi del trasporto ottimale, e la loro comprensione profonda è prerequisito per le costruzioni dei capitoli successivi.

1.1 Spazi Metrici Polacchi e Sigma-Algebra di Borel

Sia (X, d) uno spazio metrico. Si dice che X è uno spazio polacco se ammette una metrica equivalente rispetto alla quale risulta completo e separabile, ossia se possiede una successione densa numerabile e ogni successione di Cauchy converge in X. Questa definizione è intrinseca nel senso seguente: non dipende dalla particolare metrica che realizza completezza e separabilità, ma soltanto dalla topologia sottostante, sicché

la proprietà di essere uno spazio polacco è una proprietà topologica, non metrica in senso stretto. È dunque più appropriato parlare di spazi topologici polacchi, intendendo spazi che ammettono almeno una metrica equivalente che li renda completi e separabili.

Gli esempi paradigmatici di spazi polacchi comprendono: lo spazio euclideo $\mathbb{R}^n$ con la metrica euclidea standard, ogni spazio di Banach separabile (si pensi agli spazi $L^p(\mu)$ per $1 \leq p < \infty$ e μ σ-finita su uno spazio separabile), lo spazio $C([0,1])$ delle funzioni continue sull'intervallo unitario dotato della norma del supremo, ogni spazio metrico compatto separabile (ad esempio i compatti di Cantor), il toro $\mathbb{T}^n = (\mathbb{R}/\mathbb{Z})^n$ con la metrica piatta indotta, e ogni sottoinsieme G_δ di uno spazio polacco, dove G_δ designa un'intersezione numerabile di aperti. Quest'ultimo fatto è particolarmente rilevante perché permette di riconoscere come polacchi insiemi che non sono chiusi: ad esempio, l'insieme dei numeri irrazionali, che è un G_δ denso in $\mathbb{R}$, è uno spazio polacco omeomorfo allo spazio $\mathbb{N}^{\mathbb{N}}$ delle successioni di numeri naturali con la topologia prodotto.

Una proprietà importante degli spazi polacchi è la loro σ-compattezza rispetto a metriche appropriate: ogni spazio polacco può essere scritto come unione numerabile di insiemi compatti, proprietà che si dimostra costruendo, a partire dalla densità numerabile, una successione di reti finite ε-dense con ε decrescente. Più precisamente, se $(x_k)_{k\geq 1}$ è una successione densa in X, allora per ogni $n \in \mathbb{N}$ l'insieme $K_n := \bigcap_{k=1}^{\infty} \overline{B}(x_k, 1/n)$ (la chiusura della palla di raggio $1/n$) non è in generale compatto, ma la chiusura di un'opportuna unione finita di tali palle lo è rispetto alla completezza. La σ-compattezza si esprime più precisamente tramite il concetto di totale limitatezza: uno spazio metrico completo è compatto se e soltanto se è totalmente limitato, e uno spazio

polacco è unione numerabile di suoi sottoinsiemi totalmente limitati (e quindi relativamente compatti nella completezza).

La σ-algebra di Borel $\mathcal{F}(X)$ è la più piccola σ-algebra che contiene tutti gli aperti di X. In uno spazio polacco separabile, $\mathcal{F}(X)$ è generata tanto dagli aperti quanto dai chiusi, e più in generale da qualsiasi base numerabile della topologia. In particolare, ogni palla aperta B(x, r) è un boreliano, ed ogni funzione continua è misurabile rispetto a $\mathcal{F}(X)$. Una misura di probabilità su $(X, \mathcal{F}(X))$ è una funzione di insieme $\mu : \mathcal{F}(X) \to [0,1]$ σ-additiva con $\mu(X) = 1$. L'insieme di tutte le misure di probabilità su X viene indicato con $\mathcal{P}(X)$. Una misura $\mu \in \mathcal{P}(X)$ è detta misura di Radon se per ogni ε > 0 e ogni insieme boreliano A si ha

$$\mu(A) = \sup \{ \mu(K) : K \subset A, K \text{ compatto} \}$$

ovvero se μ è regolare dall'interno rispetto ai compatti. La proprietà di Radon è una condizione di regolarità che garantisce, in particolare, che la misura è determinata dai suoi valori sui compatti. Negli spazi polacchi, ogni misura di Borel è automaticamente di Radon: questo è un teorema non banale che si basa in modo cruciale sulla σ-compattezza e sulla struttura completa della metrica. La sua dimostrazione procede approssimando ogni boreliano dall'interno con unioni finite di palle di raggio piccolo, e quindi con compatti (grazie alla totalità limitata), e controllando la σ-additività del processo di approssimazione tramite la continuità di μ dall'alto su insiemi decrescenti.

La coincidenza tra misure di Borel e misure di Radon negli spazi polacchi semplifica considerevolmente l'analisi del trasporto ottimale, perché permette di approssimare ogni misura di probabilità con misure

supportate su compatti. Questa approssimazione è cruciale nella dimostrazione della compattezza di $\Pi(\mu, \nu)$ e nella verifica dell'equistrettezza di famiglie di piani di trasporto.

Un altro fatto fondamentale degli spazi polacchi è il teorema di Lusin, che afferma che ogni funzione misurabile si restringe a una funzione continua su un insieme di misura vicina a 1. Più precisamente:

Teorema 1.1 (Lusin).

Siano X uno spazio polacco, $\mu \in \mathscr{P}(X)$ e $f : X \to \mathbb{R}$ una funzione misurabile. Per ogni ε > 0 esiste un sottoinsieme compatto $K_\varepsilon \subset X$ con $\mu(K_\varepsilon) \geq 1 - \varepsilon$ tale che la restrizione $f|_{K_\varepsilon}$ sia continua.

Dimostrazione. La dimostrazione si basa sul fatto che ogni funzione misurabile è limite quasi uniforme di funzioni continue, e sull'aprossimabilità dall'interno da parte di compatti. Si approssima f con una successione $(f_n)_n$ di funzioni semplici, ognuna approssimata da continue per il teorema di Tietze sui chiusi; si trova poi un compatto su cui la convergenza è uniforme per il teorema di Egorov. La continuità di $f|_{K_\varepsilon}$ segue dalla convergenza uniforme di funzioni continue.

Questo argomento, sviluppato nel dettaglio, utilizza la regolarità di Radon di μ per garantire la compattezza di K_ε. □

Il teorema di Lusin ha conseguenze importanti per il trasporto ottimale: permette, in molte situazioni, di sostituire l'ipotesi di continuità delle funzioni di costo con quella di misurabilità, riducendosi poi a un'approssimazione per compatti tramite Lusin.

1.2 Convergenza Stretta e Teorema di Prokhorov

Sull'insieme $\mathscr{P}(X)$ si definisce la convergenza stretta (o convergenza debole*) nel modo seguente. Una successione $(\mu_n)_n \subset \mathscr{P}(X)$ converge strettamente a $\mu \in \mathscr{P}(X)$, e si scrive $\mu_n \rightharpoonup \mu$, se

$$\int_X f \, d\mu_n \to \int_X f \, d\mu \quad \text{per ogni } f \in C_b(X)$$

dove $C_b(X)$ designa lo spazio delle funzioni continue e limitate su X. Questa nozione è la traduzione misurabile dell'usuale convergenza debole* nel duale di $C_0(X)$; per gli spazi polacchi essa viene anche chiamata convergenza nella topologia di Prokhorov, dal nome dello studioso che ne caratterizzò la compattezza in termini probabilistici. La topologia di Prokhorov su $\mathscr{P}(X)$ è metrizzabile quando X è separabile: una metrica compatibile è la distanza di Prokhorov stessa, definita da

$$\rho(\mu, \nu) := \inf \{ \varepsilon > 0 : \mu(A) \leq \nu(A^\varepsilon) + \varepsilon \quad \text{per ogni chiuso } A \subset X \}$$

dove $A^\varepsilon := \{ x \in X : d(x, A) < \varepsilon \}$ è il ε-intorno di A. La distanza di Prokhorov rende $(\mathscr{P}(X), \varrho)$ uno spazio metrico separabile e completo quando X è polacco, confermando la struttura pienamente analizzabile di questo spazio di misure.

Una caratterizzazione equivalente della convergenza stretta, di grande utilità pratica, è fornita dal teorema di Portmanteau, che traduce la

condizione integrale su tutte le funzioni continue limitate in condizioni puramente topologiche sugli insiemi di misura.

Teorema 1.2 (Portmanteau).

Siano μ, $\mu_n \in \mathscr{P}(X)$ per $n \in \mathbb{N}$. Le seguenti condizioni sono equivalenti:

(i) $\mu_n \rightharpoonup \mu$, ossia $\int f\, d\mu_n \to \int f\, d\mu$ per ogni $f \in C_b(X)$.

(ii) $\limsup_n \mu_n(F) \leq \mu(F)$ per ogni chiuso $F \subset X$.

(iii) $\liminf_n \mu_n(G) \geq \mu(G)$ per ogni aperto $G \subset X$.

(iv) $\lim_n \mu_n(A) = \mu(A)$ per ogni boreliano $A \subset X$ con $\mu(\partial A) = 0$ (dove ∂A è il bordo topologico di A).

(v) $\int f\, d\mu_n \to \int f\, d\mu$ per ogni $f : X \to \mathbb{R}$ uniformemente continua e limitata.

Dimostrazione. L'equivalenza (i) $\Leftrightarrow$ (ii) $\Leftrightarrow$ (iii) è la parte più delicata. Supponiamo (i) e sia F chiuso. Per ogni ε > 0 definiamo $f_\varepsilon(x) := \max(0, 1 - d(x, F)/\varepsilon)$, che è continua, limitata, vale 1 su F e 0 fuori dall'ε-intorno di F. Allora $\mu_n(F) \leq \int f_\varepsilon\, d\mu_n \to \int f_\varepsilon\, d\mu \leq \mu(F^\varepsilon)$. Mandando $\varepsilon \to 0$ e usando la regolarità dall'esterno di μ, si ottiene $\limsup_n \mu_n(F) \leq \mu(F)$, cioè (ii). L'implicazione (ii) $\Rightarrow$ (iii) è per complemento: se G è aperto, $F := X \setminus G$ è chiuso, e $\limsup \mu_n(F) \leq \mu(F)$ implica $\liminf \mu_n(G) \geq 1 - \mu(F) = \mu(G)$. La (iv) segue combinando (ii) e (iii): $\mu(\overline{G}) \geq \limsup \mu_n(\overline{G}) \geq \limsup \mu_n(A) \geq \liminf \mu_n(A) \geq \liminf \mu_n(\mathrm{int}\, A) \geq \mu(\mathrm{int}\, A)$; se $\mu(\partial A) = 0$ allora $\mu(\overline{G}) = \mu(\mathrm{int}\, A)$ e dunque tutti i termini collassano.

L'equivalenza (v) $\Leftrightarrow$ (i) è immediata perché in uno spazio metrico separabile le funzioni uniformemente continue e limitate sono

dense in $C_b(X)$ nella topologia della convergenza compatta, e la condizione di equistrettezza garantisce che il passaggio al limite preserva gli integrali. □

Una famiglia $\mathcal{F} \subset \mathcal{P}(X)$ è detta equistretta (o uniformemente tight) se per ogni ε > 0 esiste un compatto $K_\varepsilon \subset X$ tale che $\mu(K_\varepsilon) \geq 1 - \varepsilon$ per ogni $\mu \in \mathcal{F}$. L'equistrettezza cattura l'idea che le misure della famiglia non disperdano massa all'infinito in modo incontrollato: essa è la condizione giusta per garantire la precompattezza nella topologia della convergenza stretta, come afferma il teorema di Prokhorov.

Teorema 1.3 (Prokhorov).

Sia X uno spazio polacco. Una famiglia $\mathcal{F} \subset \mathcal{P}(X)$ è precompatta nella topologia della convergenza stretta se e soltanto se è equistretta. In particolare, da ogni successione equistretta si può estrarre una sottosuccessione convergente strettamente.

Dimostrazione. Dimostriamo la sufficienza: equistrettezza implica precompattezza. Sia $(\mu_n)_n \subset \mathcal{F}$ equistretta. Poiché X è separabile, esiste una base numerabile $(f_k)_k$ di $C_b(X)$ nell'usuale seminorma uniforme su compatti. Per induzione diagonale, si estrae una sottosuccessione (lungo cui rinominiamo μ_n per semplicità di notazione) tale che $\int f_k \, d\mu_n$ converge per ogni k fissato. Si definisce il funzionale lineare $L(f_k) := \lim_n \int f_k \, d\mu_n$ su questo insieme denso. Si estende L per continuità a $C_b(X)$: la continuuità segue dall'equilimitatezza $|\int f \, d\mu_n| \leq \|f\|_\infty$ e dalla densità di (f_k) nella topologia compatta. La σ-additività di L, ossia il

fatto che L corrisponde a una misura $\mu \in \mathscr{P}(X)$ per il teorema di Riesz-Markov, si ottiene dall'equistrettezza nel modo seguente: per ogni ε > 0 si scelga K_ε compatto con $\mu_n(K_\varepsilon) \geq 1 - \varepsilon$ per ogni n, e si verifica che L è concentrato su K_ε a meno di ε, da cui la regolarità di Radon del funzionale limite. Dimostriamo la necessità: precompattezza implica equistrettezza. Poiché X è polacco, esso è omeomorfo a un sottoinsieme G_δ dello spazio di Hilbert separabile ℓ^2, e dunque è contenuto in uno spazio polacco compatto (la completamento). Per ogni ε > 0, poiché X è σ-compatto (unione numerabile di compatti K_m), si scrive $\mu(X \setminus \cup_{m=1}^M K_m) < \varepsilon$ scegliendo M grande; ma la scelta di M dipende da μ, e occorre un argomento di uniformità. Se $\mathscr{F}$ è precompatta ma non equistretta, esistono ε > 0 e una sottosuccessione (μ_{n_k}) con $\mu_{n_k}(K) < 1 - \varepsilon$ per ogni K compatto e ogni k. Ma ogni punto di accumulazione μ_∞ di (μ_{n_k}) nella convergenza stretta soddisfa $\mu_\infty(X) = 1$ (per il Portmanteau, $\liminf \mu_{n_k}(G) \geq \mu_\infty(G)$ per ogni aperto G, e X stesso è aperto), mentre la condizione $\mu_{n_k}(K) < 1 - \varepsilon$ per ogni K compatto porta, nel limite, a $\mu_\infty(X) \leq 1 - \varepsilon$, contraddizione. □

1.3 Il Teorema di Disintegrazione di Rokhlin

Il teorema di disintegrazione, nella formulazione dovuta a Rokhlin, afferma che ogni misura di probabilità su un prodotto di spazi polacchi si scompone in modo unico in una famiglia di misure condizionate

parametrizzate dalla variabile-base. Questo risultato è fondamentale nella teoria del trasporto ottimale, dove si lavora con misure su prodotti $X \times Y$ e se ne studiano le proiezioni marginali. Prima di enunciarlo in piena generalità, è utile motivarlo attraverso il concetto di probabilità condizionata rispetto a una σ-subalgebra.

Siano $(\Omega, \mathcal{F}, \mu)$ uno spazio di probabilità e $\mathcal{E} \subset \mathcal{F}$ una σ-subalgebra. Per ogni funzione $f \in L^1(\mu)$, la speranza condizionata $\mu(f \mid \mathcal{E})$ è l'unica funzione $\mathcal{E}$-misurabile g tale che $\int_A g \, d\mu = \int_A f \, d\mu$ per ogni $A \in \mathcal{E}$. L'esistenza di g è garantita dal teorema di Radon-Nikodým applicato al funzionale $\nu(A) := \int_A f \, d\mu$, che è una misura assolutamente continua rispetto a $\mu|_{\mathcal{E}}$. La mappa $f \mapsto \mu(f \mid \mathcal{E})$ è una proiezione lineare contrattiva da $L^1(\mu)$ in $L^1(\mu|_{\mathcal{E}})$.

Nel contesto dei prodotti, la disintegrazione rispetto alla proiezione su uno dei fattori è la versione più concreta e geometricamente significativa di questo concetto. Il teorema di Rokhlin ne fornisce la versione misurabile parametrizzata.

Teorema 1.4 (Disintegrazione di Rokhlin).

Siano X e Y spazi polacchi, $\pi : X \times Y \to X$ la proiezione sul primo fattore, e $\gamma \in \mathcal{P}(X \times Y)$ una misura di probabilità con marginale $\mu := (\pi_X)_{\#}\gamma \in \mathcal{P}(X)$. Allora esiste una famiglia μ-quasi ovunque unica di misure $(\gamma_x)_{x \in X} \subset \mathcal{P}(Y)$ tali che:

(i) La mappa $x \mapsto \gamma_x$ è $(\mathcal{F}(X), \mathcal{F}(\mathcal{P}(Y)))$-misurabile, dove $\mathcal{P}(Y)$ è dotato della topologia della convergenza stretta.

(ii) Per ogni funzione misurabile $f : X \times Y \to [0, \infty)$,

$$\int_{X \times Y} f(x,y) \, d\gamma(x,y) = \int_X \left(\int_Y f(x,y) \, d\gamma_x(y) \right) d\mu(x).$$

Le misure γ_x sono dette le disintegrate (o misure condizionate) di γ rispetto a π.

Dimostrazione. L'esistenza si dimostra tramite un argomento di regolarità misurabile specifico degli spazi polacchi, che permette di scegliere rappresentanti misurabili per le probabilità condizionate. Si fissa una base numerabile $(f_k)_k$ di $C_b(Y)$ e si definisce, per ogni k, la funzione $g_k(x) := \int_Y f_k(y)\, d\gamma_x(y)$ come la speranza condizionata di $f_k(y)$ dato $\pi(x,y) = x$ nel senso dell'integrale disintegrato. Ogni g_k è determinata μ-q.o. in modo unico. Su un insieme di misura piena (fuori da un'unione numerabile di insiemi di misura nulla) si definisce γ_x come l'unica misura in $\mathscr{P}(Y)$ tale che $\int f_k\, d\gamma_x = g_k(x)$ per tutti i k; l'unicità segue dalla densità di (f_k) in $C_b(Y)$ e dal teorema di Riesz-Markov. L'estensione ai punti rimanenti si effettua ponendo γ_x uguale a una misura fissa (ad esempio δ_{y_0} per un punto $y_0 \in Y$) senza alterare la formula di disintegrazione. L'unicità della disintegrazione μ-q.o. segue dall'unicità della speranza condizionata e dal fatto che $C_b(Y)$ separa i punti di $\mathscr{P}(Y)$ nella topologia stretta. □

Un corollario fondamentale della disintegrazione è il seguente criterio di marginalità: una misura $\gamma \in \mathscr{P}(X \times Y)$ ha marginale μ su X e ν su Y se e soltanto se le disintegrate $(\gamma_x)_x$ rispetto a X verificano la condizione di consistenza

$$\int_X \gamma_x \, d\mu(x) = \nu,$$

nel senso che $\int_X (\int_Y f \, d\gamma_x) \, d\mu = \int_Y f \, d\nu$ per ogni $f \in C_b(Y)$. Questa riformulazione condizionata dei vincoli di marginalità sarà essenziale nell'analisi degli accoppiamenti ottimali, in particolare nella dimostrazione dell'unicità dei piani ottimali tramite la struttura del loro supporto.

Un'ulteriore applicazione del teorema di disintegrazione è il cosiddetto lemma di incollaggio (gluing lemma), che permette di concatenare piani di trasporto relativi a marginalità diverse. Sia Z un terzo spazio polacco, e siano $\gamma_1 \in \Pi(\mu, \varrho)$ e $\gamma_2 \in \Pi(\varrho, \nu)$ due piani di trasporto con marginale comune intermedio $\varrho \in \mathscr{P}(Z)$. Tramite la disintegrazione di γ_1 rispetto a Z si ottengono le misure condizionate $(\gamma_1)_z \in \mathscr{P}(X)$, e analogamente tramite γ_2 si ottengono $(\gamma_2)_z \in \mathscr{P}(Y)$. Si definisce la misura incollata

$$\gamma := \int_Z (\gamma_1)_z \otimes (\gamma_2)_z \, d\rho(z) \in \mathscr{P}(X \times Z \times Y).$$

La proiezione di γ su $X \times Y$ è allora un piano di trasporto in $\Pi(\mu, \nu)$, e per la disuguaglianza triangolare della distanza d si ha $d(x, y) \leq d(x, z) + d(z, y)$ per ogni (x, z, y), il che permette di stimare il costo di questo piano incollato in termini dei costi di γ_1 e γ_2. Il lemma di incollaggio è lo strumento essenziale nella dimostrazione della disuguaglianza triangolare per la distanza di Wasserstein.

1.4 Mappe Misurabili e Push-Forward

Siano X e Y spazi polacchi e $T : X \to Y$ una mappa misurabile. Il push-forward (o immagine diretta) di $\mu \in \mathscr{P}(X)$ tramite T è la misura $T_{\#}\mu \in \mathscr{P}(Y)$ definita da

$$(T_{\#}\mu)(B) := \mu(T^{-1}(B)) \quad \text{per ogni } B \in \mathscr{F}(Y).$$

La formula di cambio di variabili per il push-forward afferma che per ogni funzione misurabile $f : Y \to [0, \infty]$,

$$\int_Y f(y)\, d(T_\#\mu)(y) = \int_X f(T(x))\, d\mu(x).$$

Questa relazione si verifica inizialmente per indicatrici di boreliani — per cui essa coincide con la definizione di push-forward — e si estende poi per linearità alle funzioni semplici e per monotona convergenza (teorema di Beppo Levi) a tutte le funzioni misurabili non negative. L'estensione a funzioni integrabili non necessariamente non negative richiede la separazione della parte positiva e negativa, e presuppone l'integrabilità di f rispetto a $T_\#\mu$, equivalente all'integrabilità di $f \circ T$ rispetto a μ.

Il push-forward gode di importanti proprietà di continuità e stabilità rispetto alla convergenza stretta. Più precisamente: se $\mu_n \rightharpoonup \mu$ in $\mathscr{P}(X)$ e $T : X \to Y$ è continua, allora $T_\#\mu_n \rightharpoonup T_\#\mu$ in $\mathscr{P}(Y)$. Questo segue immediatamente dalla definizione: per ogni $g \in C_b(Y)$, si ha $g \circ T \in C_b(X)$, dunque $\int g\, d(T_\#\mu_n) = \int (g\circ T)\, d\mu_n \to \int (g\circ T)\, d\mu = \int g\, d(T_\#\mu)$. Una versione più sottile di questo risultato, utile nel contesto del trasporto ottimale, afferma che se $\mu_n \rightharpoonup \mu$ e $T_n \to T$ uniformemente sui compatti, allora $(T_n)_\#\mu_n \rightharpoonup T_\#\mu$. La dimostrazione richiede un argomento di equistrettezza: le immagini $(T_n)_\#\mu_n$ sono equistrettette perché le μ_n sono equistrettette (Prokhorov) e T_n converge uniformemente su compatti.

Un caso di particolare importanza è quello in cui $X = Y = \mathbb{R}^n$ e T è un diffeomorfismo di classe C^1. In questo contesto, se $\mu = f \cdot L^n$ (misura assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue n-dimensionale L^n) con densità $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$, allora $T_\#\mu$ è ancora assolutamente continua rispetto a L^n con densità

$$g(y) = f(T^{-1}(y)) \cdot |\det JT^{-1}(y)|$$

dove JT^{-1} designa la matrice jacobiana di T^{-1}. Questa formula, che è la classica formula di cambio di variabili per integrali multipli, si verifica nel modo seguente: per ogni boreliano $B \subset \mathbb{R}^n$,

$$(T_;\mu)(B) = \mu(T^{-1}(B)) = \int_\{T^{-1}(B)\} f(x)\, dx = \int_B f(T^{-1}(y))\, |\det JT^{-1}(y)|\, dy$$

dove il terzo uguale è il teorema di cambio di variabili di Lebesgue per diffeomorfismi. La densità di $T_;\mu$ è quindi $g(y) = f(T^{-1}(y))\ |\det JT^{-1}(y)|$, che è la formula (1.7) dell'originale monografia. Questa relazione è il punto di partenza per la derivazione dell'equazione di Monge–Ampère nel Capitolo 6.

Un'ulteriore proprietà del push-forward di grande importanza per il trasporto ottimale è il suo comportamento rispetto alle composizioni. Se $T : X \to Y$ e $S : Y \to Z$ sono mappe misurabili, allora $(S \circ T)_;\mu = S_;(T_;\mu)$. Questo fatto elementare permette di comporre le mappe di trasporto in modo coerente, e è alla base della costruzione degli aggiustamenti di McCann nella dimostrazione del teorema di interpolazione.

Capitolo 2 — Il Problema di Monge: Formulazione, Esistenza e Struttura

Nel 1781 il matematico e ingegnere militare Gaspard Monge pose, in termini concreti e operativi nel suo celebre *Mémoire sur la théorie des déblais et des remblais*, il seguente problema: data una distribuzione di terra da rimuovere (déblais) e una distribuzione di aree da riempire (remblais), entrambe di volume totale uguale, trovare il modo di trasportare la terra nelle buche minimizzando il lavoro complessivo. Nel linguaggio moderno, il lavoro è proporzionale al prodotto tra massa trasportata e distanza percorsa, e la minimizzazione avviene sulla classe di tutte le funzioni di trasporto che ridistribuiscono la terra nella configurazione finale prescritta. Monge stesso osservò — con la lucida intuizione geometrica che contraddistingue i grandi matematici — che le linee di trasporto ottime non si devono incrociare, e che esse risultano ortogonali alle superficie di livello della distribuzione iniziale. Questa osservazione, corretta nella sua sostanza, doveva attendere quasi due secoli per ricevere una dimostrazione rigorosa nella forma del teorema di Brenier.

La difficoltà intrinseca del problema di Monge, già avvertita dallo stesso Monge, risiede nel fatto che la classe delle mappe di trasporto ammissibili è un insieme non convesso e non chiuso nella topologia naturale, il che rende i metodi variazionali classici inapplicabili in modo diretto. In particolare, l'infimo in (2.1) potrebbe non essere raggiunto, come dimostrano esempi elementari: se $\mu = \delta_x$ è una massa di Dirac e ν non lo è, non esiste alcuna mappa misurabile T con $T_{\#}\delta_x = \nu$ (poiché ogni mappa misurabile porta masse di Dirac in masse di Dirac). Più in

generale, il problema di Monge non ammette soluzione quando μ è portata da un insieme di misura di Lebesgue nulla rispetto alla geometria richiesta dall'ottimalità.

2.1 Formulazione del Problema di Monge

Siano X e Y spazi polacchi, $\mu \in \mathscr{P}(X)$ e $\nu \in \mathscr{P}(Y)$ due misure di probabilità, e $c : X \times Y \to [0, +\infty]$ una funzione di costo misurabile. Una mappa misurabile $T : X \to Y$ si dice mappa di trasporto da μ a ν se $T_{\#}\mu = \nu$, ossia se redistribuisce la massa di μ esattamente secondo la misura ν. L'insieme di tutte le mappe di trasporto da μ a ν viene indicato con $\mathscr{T}(\mu, \nu)$. Il problema di Monge con costo c richiede di trovare una mappa $T^* \in \mathscr{T}(\mu, \nu)$ che minimizzi il costo totale:

$$M(\mu, \nu; c) := \inf \{ \int_X c(x, T(x))\, d\mu(x) : T \in \mathscr{T}(\mu, \nu) \}$$

L'infimo è detto valore del problema di Monge. Il caso di maggiore interesse teorico e applicativo è quello con $X = Y = \mathbb{R}^n$ e costo quadratico $c(x, y) = |x - y|^2$, per il quale il problema si scrive

$$M_2(\mu, \nu) := \inf \{ \int_{\mathbb{R}^n} |x - T(x)|^2\, d\mu(x) : T_{\#}\mu = \nu \}$$

Occorre osservare che l'insieme $\mathscr{T}(\mu, \nu)$ può essere vuoto: ciò accade, come già notato, quando μ è una massa di Dirac e ν non lo è. Anche quando $\mathscr{T}(\mu, \nu)$ è non vuoto, esso non è un insieme convesso: se T_1 e T_2 sono mappe di trasporto, la media $(1/2)(T_1 + T_2)$ non lo è in generale, perché la media di mappe misurabili non rispetta la condizione di marginalità in modo ovvio. Questa non convessità è la ragione per cui Kantorovich, nel 1942, propose il rilassamento che porta il suo nome, di cui ci occuperemo nel Capitolo 3.

Prima di procedere alla soluzione del problema di Monge nel caso del costo quadratico, è utile discutere alcuni esempi che illustrano la struttura del problema.

Se $X = Y = [0, 1]$ (equipaggiato con la metrica euclidea) e $\mu = \nu = L^1|_{[0,1]}$ è la misura di Lebesgue sull'intervallo, allora qualsiasi mappa di trasporto $T : [0,1] \to [0,1]$ che preservi la misura di Lebesgue (cioè una mappa misura-preservante) è ammissibile. Per il costo $c(x,y) = |x-y|$, la mappa ottimale è l'identità $T(x) = x$ (nessun trasporto), con costo zero. Per il costo $c(x,y) = |x + y - 1|$ (che favorisce il trasporto dei punti vicino a 0 vicino a 1 e viceversa), la mappa ottimale è la riflessione $T(x) = 1 - x$. Questo esempio mostra che la struttura della mappa ottimale dipende in modo cruciale dalla funzione di costo.

Un esempio più significativo per il costo quadratico: se μ e ν sono le distribuzioni uniforme su $[0, 1/2]$ e $[1/2, 1]$ rispettivamente (normalizzate a misure di probabilità), la mappa ottimale per il costo quadratico è la traslazione $T(x) = x + 1/2$, che sposta ogni punto della prima metà dell'intervallo nella seconda metà preservando l'ordine. Questa scelta minimizza il costo quadratico tra tutte le mappe di trasporto: qualsiasi altra mappa avrebbe un costo maggiore perché causerebbe *incroci* nel trasporto, che è sempre subottimale per costi strettamente convessi (una versione quantitativa di questa osservazione è esattamente il teorema di Brenier).

2.2 Il Teorema di Brenier: Esistenza, Unicità e Struttura della Mappa Ottimale

Il risultato fondamentale che dissolve le difficoltà di esistenza nel caso del costo quadratico è il teorema di Brenier, dimostrato nella forma completa tra il 1987 e il 1991. Esso afferma che, quando la misura di partenza μ è assolutamente

continua rispetto alla misura di Lebesgue, il problema di Monge ammette un'unica soluzione, la quale è necessariamente il gradiente di una funzione convessa. Questo collegamento tra trasporto ottimale e funzioni convesse è di una profondità straordinaria: la convessità è esattamente la condizione che garantisce l'invertibilità quasi ovunque del gradiente (per il teorema di Aleksandrov sulle funzioni convesse), e dunque la biiettività della mappa di trasporto. Il teorema di Brenier è anche un risultato di fattorizzazione polare misurabile: esso afferma che ogni mappa misurabile $T : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ con $T_{\#}\mu = \nu$ si fattorizza, in modo essenzialmente unico, come $T = S \circ \nabla\varphi$, dove $\nabla\varphi$ è un gradiente convesso (il trasporto ottimale) e $S : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ è una mappa misura-preservante rispetto a ν (la componente *rotazionale* non ottimale).

Teorema 2.1 (Brenier, 1991).

Siano $\mu, \nu \in \mathscr{P}(\mathbb{R}^n)$ misure di probabilità con momenti secondi finiti, $\int |x|^2 \, d\mu < \infty$ e $\int |y|^2 \, d\nu < \infty$, e si supponga che μ sia assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue n-dimensionale, $\mu \ll L^n$. Allora:

(i) Esiste un'unica (nel senso μ-q.o.) mappa di trasporto ottimale $T^* : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ per il problema di Monge con costo quadratico.

(ii) T^* è il gradiente di una funzione convessa $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$: $T^* = \nabla\varphi$ a μ-q.o.

(iii) La coppia (φ, φ^*), dove φ^* è la trasformata di Legendre–Fenchel di φ, fornisce i potenziali duali ottimali nel senso di Kantorovich. La mappa inversa è $(T^*)^{-1} = \nabla\varphi^*$ e si ha $(T^*)_{\#}\mu = \nu$ e $(\nabla\varphi^*)_{\#}\nu = \mu$.

Dimostrazione. La dimostrazione si articola in due fasi. La prima fase mostra che ogni mappa ottimale deve essere il

gradiente di una funzione convessa; la seconda costruisce esplicitamente tale gradiente.

Prima fase: l'ottimalità implica la struttura di gradiente convesso. Si supponga che T sia una mappa di trasporto ottimale per $M_2(\mu, \nu)$. Poiché $c(x,y) = |x-y|^2 = |x|^2 - 2x\cdot y + |y|^2$, minimizzare $\int|x-T(x)|^2 d\mu$ equivale a massimizzare il funzionale $J(T) = \int x\cdot T(x)\, d\mu(x)$ a parità di T_;μ = ν, perché i termini $\int|x|^2 d\mu$ e $\int|y|^2 d\nu$ sono costanti rispetto alla scelta di T. Sia dunque T ottimale per J.

Si perturba T in modo ammissibile: per ogni coppia di punti x_1, x_2 nel supporto di μ, si considera la perturbazione che scambia i valori di T su intorni disgiunti di x_1 e x_2. Più formalmente, per ogni ε > 0 piccolo si definisce una mappa T_ε che coincide con T fuori da due palle disgiunte $B(x_1, r)$ e $B(x_2, r)$, e che scambia i valori $T(x_1)$ e $T(x_2)$ all'interno. La condizione T_;μ = Tε_;μ = ν è preservata dallo scambio simmetrico. L'ottimalità di T richiede $J(T) \geq J(T_\varepsilon)$, il che, al primo ordine in ε, si traduce in:

$$x_1 \cdot T(x_1) + x_2 \cdot T(x_2) \geq x_1 \cdot T(x_2) + x_2 \cdot T(x_1),$$

ovvero $(x_1 - x_2) \cdot (T(x_1) - T(x_2)) \geq 0$. Questa disuguaglianza, valida per ogni coppia x_1, x_2 nel supporto di μ (cioè μ-q.o.), afferma che T è monotona in senso vettoriale: i vettori $x_1 - x_2$ e $T(x_1) - T(x_2)$ formano un angolo acuto. La proprietà di monotonia ciclica (analoga a quella descritta nel Capitolo 3 per i piani) si ottiene estendendo l'argomento a n-ple di punti anziché coppie: per ogni n-pla $(x_1, ..., x_n)$ e ogni permutazione σ si ha $\sum x_i \cdot T(x_i) \geq \sum x_i \cdot T(x_{\sigma(i)})$. Una mappa monotona (ciclicamente monotona) e misurabile è, per il teorema di Rockafellar, uguale μ-q.o. al sottodifferenziale ∂φ di una funzione convessa $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$. Poiché $\mu \ll L^n$, la funzione convessa φ è differenziabile

L^n-q.o. per il teorema di Aleksandrov, e dunque $\partial\varphi(x) = \{\nabla\varphi(x)\}$ μ-q.o., il che conclude $T = \nabla\varphi$ μ-q.o.

Seconda fase: costruzione di φ e dimostrazione dell'esistenza. Si considera il problema duale di Kantorovich (si veda il Capitolo 3 per l'elaborazione completa). Per la dualità forte (Teorema 3.2), esistono potenziali ottimali (φ, ψ) con $\varphi(x) + \psi(y) \leq |x-y|^2$ quasi ovunque e $K(\mu, \nu) = \int\varphi\, d\mu + \int\psi\, d\nu$. La c-concavità dei potenziali ottimali implica che $x \mapsto |x|^2/2 - \varphi(x)/2$ è convessa (si veda la Sezione 3.4); denotando questa funzione con Φ, si ottiene che $T^* := \nabla\Phi$ è il gradiente convesso richiesto, e la verifica $T^*_;\mu = \nu$ segue dalla formula di cambio di variabili e dall'equazione di Monge–Ampère $\det \nabla^2\Phi = f/g(\nabla\Phi)$ (si veda il Capitolo 6). L'unicità di T^* segue dall'unicità (a meno di costanti) dei potenziali ottimali e dall'unicità del gradiente di una funzione convessa quasi ovunque.

□

La dimostrazione del Teorema di Brenier rivela la struttura profonda del problema: la mappa ottimale non è solo un minimizzatore di un funzionale, ma è il gradiente di una funzione convessa, il che la lega indissolubilmente alla geometria convessa di $\mathbb{R}^n$. La trasformata di Legendre–Fenchel φ^*, definita da

$$\varphi^*(y) := \sup_\{x \in \mathbb{R}^n\} \{ x \cdot y - \varphi(x) \},$$

fornisce la funzione convessa il cui gradiente è la mappa inversa di Brenier: $(T^*)^{-1} = \nabla\varphi^*$. La coppia (φ, φ^*) soddisfa le relazioni di involutività $(\varphi^*)^* = \varphi$ e la dualità di Fenchel: per ogni x e y, $\varphi(x) + \varphi^*(y) \geq x \cdot y$, con uguaglianza se e soltanto se $y \in \partial\varphi(x)$, il che è equivalente a $y = \nabla\varphi(x)$ quando φ è differenziabile in x.

2.3 Il Teorema di Fattorizzazione Polare di Brenier

Il teorema di Brenier ha una versione più generale, nota come teorema di fattorizzazione polare, che riguarda la decomposizione di una mappa misurabile generica in una componente ottimale (gradiente convesso) e una componente misura-preservante. Questa fattorizzazione è l'analogo misurabile della decomposizione polare di una matrice invertibile nel prodotto di una matrice simmetrica semidefinita positiva per una matrice ortogonale.

Teorema 2.2 (Fattorizzazione polare di Brenier).

Sia $\mu \in \mathscr{P}(\mathbb{R}^n)$ assolutamente continua rispetto a L^n, e sia $s : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ una mappa misurabile con $\int |s(x)|^2 \, d\mu(x) < \infty$. Poniamo $\nu := s_{\#}\mu$. Allora esiste un'unica (μ-q.o.) fattorizzazione

$$s(x) = \eta(\nabla \varphi(x)) \quad \mu\text{-q.o.},$$

dove $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ è una funzione convessa e $\eta : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ è una mappa misura-preservante rispetto a ν (cioè $\eta_{\#}\nu = \nu$). La componente $\nabla \varphi$ è la mappa di trasporto ottimale da μ a ν.

La fattorizzazione polare ha un'interpretazione geometrica bella: ogni mappa misurabile da μ a ν si decompone nella parte *minima* (il trasporto ottimale $\nabla \varphi$, che sposta la massa nel modo più economico) e in una parte *rotazionale* η, che rimescola la massa di ν senza alterarla. La componente η è irrilevante per il costo quadratico (poiché non sposta massa rispetto a ν), ma è rilevante per altri funzionali. La struttura di questa decomposizione richiama la scomposizione di ogni diffeomorfismo in una mappa volume-preservante e una deformazione simmetrica, e ha applicazioni in geometria differenziale e in meccanica dei fluidi incomprimibili.

2.4 La Mappa di Brenier nel Caso Gaussiano

Un esempio esplicito e illuminante si ottiene quando $\mu = N(m_0, \Sigma_0)$ e $\nu = N(m_1, \Sigma_1)$ sono due distribuzioni gaussiane n-dimensionali con vettori di media $m_0, m_1 \in \mathbb{R}^n$ e matrici di covarianza Σ_0, Σ_1 definite positive. In questo caso la mappa di Brenier è affine: $T^*(x) = Ax + b$, dove A è una matrice simmetrica definita positiva e b è una traslazione.

Per determinare A e b, si impone il vincolo di push-forward. Se $\mu = N(m_0, \Sigma_0)$ e $T(x) = Ax + b$, allora $T_{\#}\mu = N(Am_0 + b, A\Sigma_0 A^T)$. La condizione $T_{\#}\mu = \nu = N(m_1, \Sigma_1)$ richiede

$$Am_0 + b = m_1 \quad e \quad A\Sigma_0 A^T = \Sigma_1.$$

La seconda equazione è un'equazione matriciale per A. Tra tutte le soluzioni A alla relazione $A\Sigma_0 A^T = \Sigma_1$, quella simmetrica definita positiva è unica: si verifica sostituendo $A = \Sigma_0^{-1/2} (\Sigma_0^{1/2} \Sigma_1 \Sigma_0^{1/2})^{1/2} \Sigma_0^{-1/2}$. In questa formula, $M^{1/2}$ denota la radice quadrata positiva di una matrice simmetrica semidefinita positiva M (che è la matrice simmetrica semidefinita positiva tale che $(M^{1/2})^2 = M$). La verifica diretta è:

$$A\Sigma_0 A = \Sigma_0^{-1/2} (\Sigma_0^{1/2} \Sigma_1 \Sigma_0^{1/2})^{1/2} \Sigma_0^{-1/2} \cdot \Sigma_0 \cdot \Sigma_0^{-1/2} (\Sigma_0^{1/2} \Sigma_1 \Sigma_0^{1/2})^{1/2} \Sigma_0^{-1/2}$$

$$= \Sigma_0^{-1/2} (\Sigma_0^{1/2} \Sigma_1 \Sigma_0^{1/2}) \Sigma_0^{-1/2} = \Sigma_1,$$

dove si è usato il fatto che $(\Sigma_0^{1/2} \Sigma_1 \Sigma_0^{1/2})^{1/2} \cdot \Sigma_0^{-1/2} \cdot \Sigma_0 \cdot \Sigma_0^{-1/2} \cdot (\Sigma_0^{1/2} \Sigma_1 \Sigma_0^{1/2})^{1/2} = \Sigma_0^{1/2} \Sigma_1 \Sigma_0^{1/2}$.

La distanza di Wasserstein quadratica $W_2^2(N(m_0, \Sigma_0), N(m_1, \Sigma_1))$ è allora il costo della mappa ottimale T^*:

$$W_2^2(\mu, \nu) = \int |T^*(x) - x|^2 \, d\mu(x) = \int |Ax + b - x|^2 \, d\mu(x)$$

$$= |(A-I)m_0 + b|^2 + tr((A-I)\Sigma_0(A-I)^T).$$

Usando $b = m_1 - Am_0$, si ottiene $(A-I)m_0 + b = m_1 - m_0$, e la parte della traccia si sviluppa come

$$tr((A-I)\Sigma_0(A-I)) = tr(A\Sigma_0 A) - 2tr(A\Sigma_0) + tr(\Sigma_0) = tr(\Sigma_1) - 2tr(A\Sigma_0) + tr(\Sigma_0).$$

Ora, $tr(A\Sigma_0) = tr(\Sigma_0^{-1/2} (\Sigma_0^{1/2}\Sigma_1\Sigma_0^{1/2})^{1/2} \Sigma_0^{-1/2} \cdot \Sigma_0) = tr((\Sigma_0^{1/2}\Sigma_1\Sigma_0^{1/2})^{1/2})$. Si ottiene infine la formula di Bures–Wasserstein:

$$W_2^2(N(m_0,\Sigma_0), N(m_1,\Sigma_1)) = |m_0 - m_1|^2 + tr(\Sigma_0) + tr(\Sigma_1) - 2\, tr((\Sigma_0^{1/2}\Sigma_1\Sigma_0^{1/2})^{1/2}).$$

Questa formula è nota come distanza di Bures–Wasserstein e ha ricevuto grande attenzione in anni recenti nell'ambito della geometria delle matrici di densità quantistiche, dove le gaussiane n-dimensionali corrispondono agli stati quantistici gaussiani (stati coerenti). Il termine $tr((\Sigma_0^{1/2}\Sigma_1\Sigma_0^{1/2})^{1/2})$ è la fedeltà di Uhlmann tra gli stati gaussiani, e la distanza di Bures–Wasserstein è la distanza di Bures nella teoria dell'informazione quantistica. Questa connessione inaspettata tra trasporto ottimale e meccanica quantistica è uno degli esempi più suggestivi della trasversalità della teoria.

Capitolo 3 — Il Rilassamento di Kantorovich e la Dualità

La difficoltà intrinseca del problema di Monge — la non convessità dell'insieme delle mappe ammissibili — spinse Leonid Kantorovich nel 1942, in un contesto di economia della pianificazione durante la Seconda guerra mondiale, a proporre una versione rilassata del problema. Kantorovich, che avrebbe ricevuto il Premio Nobel per l'economia nel 1975 proprio per i suoi contributi alla teoria della programmazione lineare, osservò che la condizione $T_{\#}\mu = \nu$ imposta a una mappa è un vincolo non lineare e non convesso, ma che lo stesso vincolo, espresso in termini di una misura γ su $X \times Y$, diventa lineare: la condizione di marginalità $(\pi_X)_{\#}\gamma = \mu$ e $(\pi_Y)_{\#}\gamma = \nu$ definisce un insieme convesso e compatto. Il rilassamento di Kantorovich è dunque, nella sua essenza, la sostituzione di un problema di ottimizzazione non convesso con un programma lineare infinito-dimensionale.

Questa idea ha un valore che va ben oltre la semplice risoluzione tecnica di un problema di esistenza. Il formalismo lineare di Kantorovich ammette una teoria della dualità completa, in perfetta analogia con la programmazione lineare finito-dimensionale, e l'oggetto duale — la coppia di potenziali (φ, ψ) — ha un'interpretazione economica precisa: $\varphi(x)$ è il *prezzo* della merce nel luogo di origine x, e $\psi(y)$ è il prezzo nel luogo di destinazione y. La condizione di ammissibilità del duale, $\varphi(x) + \psi(y) \leq c(x,y)$, afferma che il differenziale di prezzo non può superare il costo di trasporto, altrimenti sarebbe profittevole arbitraggiare. La dualità forte afferma che, all'equilibrio, il guadagno totale dei produttori e dei consumatori è uguale al costo totale del trasporto ottimale.

3.1 Piani di Trasporto e l'Insieme $\Pi(\mu, \nu)$

Siano $\mu \in \mathscr{P}(X)$ e $\nu \in \mathscr{P}(Y)$. Un piano di trasporto da μ a ν è una misura di probabilità $\gamma \in \mathscr{P}(X \times Y)$ con marginali $(\pi_X)_;\gamma = \mu$ e $(\pi_Y)_;\gamma = \nu$. L'insieme di tutti i piani di trasporto da μ a ν viene indicato con $\Pi(\mu, \nu)$. Questo insieme non è mai vuoto: il piano prodotto $\gamma_0 = \mu \otimes \nu$ appartiene sempre a $\Pi(\mu, \nu)$. Il piano prodotto rappresenta il trasporto indipendente: ogni unità di massa in x viene spedita a tutti i possibili destini y in proporzione alla distribuzione ν. È il piano più diffuso possibile, e tipicamente ha costo elevato.

L'insieme $\Pi(\mu, \nu)$ ha una struttura convessa e compatta di grande convenienza analitica. La convessità è ovvia per linearità dei vincoli di marginalità: se $\gamma_1, \gamma_2 \in \Pi(\mu, \nu)$ e $t \in [0,1]$, allora $t\gamma_1 + (1-t)\gamma_2 \in \Pi(\mu, \nu)$. La compattezza nella topologia della convergenza stretta su $\mathscr{P}(X \times Y)$ segue in due passi: prima si osserva che l'equistrettezza di $\{\mu\}$ e $\{\nu\}$ come singoletti implica l'equistrettezza di $\Pi(\mu, \nu)$ per il lemma seguente, poi si osserva che $\Pi(\mu, \nu)$ è chiuso nella convergenza stretta, il che combinato con l'equistrettezza dà la compattezza per Prokhorov.

Lemma 3.1 (Equistrettezza di $\Pi(\mu, \nu)$).

Se $\mu \in \mathscr{P}(X)$ e $\nu \in \mathscr{P}(Y)$, allora la famiglia $\Pi(\mu, \nu)$ è equistretta in $\mathscr{P}(X \times Y)$.

Dimostrazione. Per ogni ε > 0, poiché $\mu \in \mathscr{P}(X)$ esiste un compatto $K\varepsilon \subset X$ con $\mu(K\varepsilon) \geq 1 - \varepsilon/2$, e analogamente esiste un compatto $L\varepsilon \subset Y$ con $\nu(L\varepsilon) \geq 1 - \varepsilon/2$. Per ogni $\gamma \in \Pi(\mu, \nu)$ si ha $\gamma(K\varepsilon \times L\varepsilon) \geq 1 - \gamma(X \times Y \setminus K\varepsilon \times L\varepsilon) \geq 1 - \gamma((X\setminus K\varepsilon) \times$

$Y) - \gamma(X \times (Y \setminus L\varepsilon)) = 1 - \mu(X \setminus K\varepsilon) - \nu(Y \setminus L\varepsilon) \geq 1 - \varepsilon$. Poiché $K\varepsilon \times L\varepsilon$ è un prodotto di compatti in uno spazio prodotto, è esso stesso compatto, e dunque $\Pi(\mu, \nu)$ è equistretta con il compatto $K\varepsilon \times L\varepsilon$.

□

Per ogni mappa di trasporto $T : X \to Y$ con $T_;\mu = \nu$, il piano $\gamma_T = (id \times T)_;\mu$, supportato sul grafico di T, appartiene a $\Pi(\mu, \nu)$. Questa corrispondenza identifica le mappe di trasporto con una sottoclasse di piani di trasporto, e il problema di Monge con la minimizzazione del funzionale lineare $\int c \, d\gamma$ su tale sottoclasse. Il rilassamento di Kantorovich estende la minimizzazione a tutto $\Pi(\mu, \nu)$: non si richiede più che il piano sia supportato sul grafico di una funzione, ma soltanto che abbia le marginali corrette. I piani non supportati su grafi di funzioni corrispondono a trasporti di massa frammentata: un'unità di massa in x viene inviata simultaneamente a diversi destini y con distribuzione γ_x (la disintegrata di γ rispetto alla prima coordinata). Questa frammentazione, impossibile nel problema di Monge, è invece ammessa nel rilassamento di Kantorovich.

3.2 Il Problema di Kantorovich come Programma Lineare

Il problema di Kantorovich con funzione di costo $c : X \times Y \to [0, +\infty]$ inferiormente semicontinua è

$$K(\mu, \nu) := \inf \{ \int_\{X \times Y\} c(x,y) \, d\gamma(x,y) : \gamma \in \Pi(\mu, \nu) \}.$$

Questo è un programma lineare infinito-dimensionale: si minimizza un funzionale lineare in γ (poiché $\gamma \mapsto \int c \, d\gamma$ è lineare) su un insieme convesso e compatto. L'esistenza di un minimizzatore è garantita dalla semicontinuità inferiore del funzionale e dalla compattezza di $\Pi(\mu, \nu)$.

Teorema 3.2 (Esistenza di piani ottimali).

Sia $c : X \times Y \to [0, +\infty]$ inferiormente semicontinua. Allora il problema di Kantorovich ammette almeno un minimizzatore $\gamma^* \in \Pi(\mu, \nu)$, detto piano di trasporto ottimale. Inoltre $K(\mu, \nu) \leq M(\mu, \nu; c)$, con uguaglianza quando il problema di Monge è ben posto e il suo valore è raggiunto.

Dimostrazione. Il funzionale $J(\gamma) = \int c \, d\gamma$ è inferiormente semicontinuo nella topologia della convergenza stretta su $\mathscr{P}(X \times Y)$ poiché c è i.s.c.: si scriva $c = \sup_k f_k$ con $f_k \in C_b(X \times Y)$ non decrescenti (possibile perché ogni funzione i.s.c. è il sup di funzioni continue limitate da sotto). Allora $\int c \, d\gamma = \sup_k \int f_k \, d\gamma$, e ogni funzionale $\gamma \mapsto \int f_k \, d\gamma$ è continuo. Il sup di funzionali continui è i.s.c. Poiché $\Pi(\mu, \nu)$ è compatto (Lemma 3.1 e chiusura) e J è i.s.c., il teorema del minimo per funzioni i.s.c. su compatti garantisce l'esistenza di $\gamma^* = \operatorname{argmin} J$. La disuguaglianza $K \leq M$ segue dal fatto che ogni mappa T genera un piano $\gamma_T \in \Pi(\mu,\nu)$ con $\int c \, d\gamma_T = \int c(x, T(x)) \, d\mu$, dunque l'infimo su Π è non superiore all'infimo sulle mappe.

□

Una proprietà notevole dei piani ottimali è la loro struttura come punti estremi di un poliedro convesso. L'insieme $\Pi(\mu, \nu)$ è un poliedro convesso nello spazio delle misure (nel caso discreto, è il politopo dei doppiamente stocastici per misure empiriche), e i punti estremi corrispondono ai piani supportati su un insieme minimale in senso combinatorico. Nel caso discreto ($\mu = (1/N)\sum_i \delta_{x_i}$ e $\nu = (1/M)\sum_j \delta_{y_j}$), i punti estremi di $\Pi(\mu, \nu)$ sono i piani supportati su al più $N + M - 1$ coppie (x_i, y_j), una proprietà analoga al fatto che le

soluzioni di base dei programmi lineari finito-dimensionali hanno supporto di cardinalità limitata.

3.3 Il Teorema di Dualità di Kantorovich

Il risultato più potente e strutturalmente profondo della teoria è il teorema di dualità, che stabilisce un'equivalenza precisa tra il problema primale di Kantorovich e un problema di massimizzazione duale. Questa dualità è l'analogo infinito-dimensionale della dualità della programmazione lineare, e si dimostra tramite il teorema del minimax nella formulazione di Ky Fan — una forma del teorema di Hahn–Banach in spazi topologici vettoriali.

Si definisce la classe delle coppie di funzioni ammissibili per il duale:

$$\Phi_c := \{ (\varphi, \psi) \in L^1(\mu) \times L^1(\nu) : \varphi(x) + \psi(y) \leq c(x,y) \quad \text{per } \mu\otimes\nu\text{-q.o. } (x,y) \}.$$

Teorema 3.3 (Dualità di Kantorovich).

Sia $c : X \times Y \to [0, +\infty]$ una funzione di costo inferiormente semicontinua con $c(x, y) \leq a(x) + b(y)$ per qualche $a \in L^1(\mu)$ e $b \in L^1(\nu)$ (condizione di integrabilità). Allora

$$K(\mu, \nu) = \sup \{ \int_X \varphi \, d\mu + \int_Y \psi \, d\nu : (\varphi, \psi) \in \Phi_c \}.$$

Il supremo al secondo membro è detto valore del duale di Kantorovich e viene denotato con $D(\mu, \nu)$. L'uguaglianza $K = D$ è nota come dualità forte. Il supremo è raggiunto da una coppia (φ^*, ψ^*) di potenziali duali ottimali.

Dimostrazione. Dimostriamo la dualità forte tramite un argomento minimax. Sia prima c continua e limitata, $c \in C_b(X \times Y)$. Si considera la funzione di Lagrange

$$L(\gamma, \varphi, \psi) = \int c \, d\gamma - \int \varphi \, d\mu - \int \psi \, d\nu + \lambda\gamma(\varphi(x) + \psi(y) - c(x,y))$$

dove il termine moltiplicativo di Lagrange codifica il vincolo primale. Il teorema del minimax di Ky Fan, applicabile qui per la compattezza di $\Pi(\mu, \nu)$ e la convessità-concavità di L, afferma che $\min_\gamma \sup_{\{\varphi,\psi\}} L = \sup_{\{\varphi,\psi\}} \min_\gamma L$. Il $\min_\gamma L$, per φ e ψ fissati, è $-\int \varphi \, d\mu - \int \psi \, d\nu$ se $\varphi(x) + \psi(y) \leq c(x,y)$ q.o. e $-\infty$ altrimenti. Dunque $\sup_{\{\varphi,\psi\}} \min_\gamma L = \sup_{\{(\varphi,\psi) \in \Phi_c\}} (\int \varphi \, d\mu + \int \psi \, d\nu) = D(\mu, \nu)$. Il lato sinistro è $K(\mu, \nu)$. Per il caso generale (c i.s.c. non limitata), si approssima c dall'alto con costi $c_n = \min(c, n)$, si ottiene la dualità $K_n = D_n$ per ogni n, e si passa al limite usando la convergenza monotona di $K_n \nearrow K$ e $D_n \nearrow D$ (verificabile tramite il lemma di Fatou monotono per i funzionali integrali). Il raggiungimento del supremo duale richiede un ulteriore argomento di compattezza nella classe dei potenziali ammissibili.

□

Il significato economico della dualità è il seguente. Il primale cerca il piano di trasporto meno costoso. Il duale cerca la coppia di prezzi (φ, ψ) che massimizza il profitto netto $\int \varphi \, d\mu + \int \psi \, d\nu$ soggetta al vincolo che i prezzi siano compatibili con i costi di trasporto (il margine di prezzo non supera il costo). La dualità forte afferma che il costo minimo del trasportatore è uguale al massimo profitto del commerciante di prezzi. Questo è il teorema fondamentale del equilibrio competitivo per il mercato del trasporto.

3.4 Trasformate c e c-Concavità

I potenziali duali ottimali godono di una proprietà strutturale che li caratterizza completamente: essi sono ciascuno la c-trasformata dell'altro. La c-trasformata è l'analogo, per costi generali, della trasformata di

Legendre–Fenchel per il costo quadratico. Per un costo $c : X \times Y \to [0, +\infty]$ e una funzione $\varphi : X \to \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$, la c-trasformata di φ è la funzione $\varphi^c : Y \to \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ definita da

$$\varphi^c(y) := \inf_{x \in X} \{ c(x, y) - \varphi(x) \}.$$

Una funzione $\varphi : X \to \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ è detta c-concava se $\varphi = \psi^c$ per qualche $\psi : Y \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, ossia se si realizza come c-trasformata di qualche altra funzione. La classe delle funzioni c-concave è stabile per la doppia trasformazione: se φ è c-concava, allora $(\varphi^c)^{\bar{c}} = \varphi$ dove $\bar{c}(y,x) := c(x,y)$. Nel caso del costo quadratico $c(x,y) = |x-y|^2/2$ su $\mathbb{R}^n$, si ha

$$\varphi^c(y) = \inf_{x} \{ |x-y|^2/2 - \varphi(x) \} = - \sup_x \{ \varphi(x) - |x-y|^2/2 \}$$
$$= - (\varphi - |\cdot|^2/2)^*(y) + |y|^2/2 - \dots ,$$

il che mostra che la c-concavità per il costo quadratico corrisponde alla semiconcavità con costante 1/2: φ è c-concava se e soltanto se $x \mapsto |x|^2/2 - \varphi(x)$ è convessa, ossia se $\varphi(x) = |x|^2/2 - \omega(x)$ con ω convessa, il che collega direttamente i potenziali duali alle funzioni di Brenier.

Il teorema di dualità afferma dunque che i potenziali ottimali (φ^*, ψ^*) sono c-concavi e reciprocamente c-trasformati: $\varphi^* = (\psi^*)^c$ e $\psi^* = (\varphi^*)^{\bar{c}}$. Questa struttura permette di ridurre la ricerca dei potenziali duali ottimali all'ottimizzazione su un'unica funzione c-concava φ : il potenziale ψ è determinato da φ come $\psi = \varphi^c$, e il duale si riscrive

$$D(\mu, \nu) = \sup_\varphi \{ \int \varphi \, d\mu + \int \varphi^c \, d\nu : \varphi : X \to \mathbb{R} \text{ c-concava} \}.$$

Questa formulazione ridotta del duale, valida per costi continui, è particolarmente utile nell'analisi numerica e nella teoria della regolarità.

3.5 Monotonia Ciclica e Condizioni di Ottimalità

La condizione che caratterizza il supporto di un piano ottimale è la c-monotonia ciclica, un criterio geometrico che generalizza la monotonia

ordinaria delle funzioni reali. Un sottoinsieme $\Gamma \subset X \times Y$ è c-ciclicamente monotono se per ogni $n \in \mathbb{N}$ e ogni n-pla di punti $(x_1, y_1), ..., (x_n, y_n) \in \Gamma$ e ogni permutazione $\sigma \in S_n$ si ha

$$\sum_{i=1}^{n} c(x_i, y_i) \leq \sum_{i=1}^{n} c(x_i, y_{\sigma(i)}).$$

La c-monotonia ciclica cattura la proprietà che nessuna permutazione locale dei destini può ridurre il costo: il piano ottimale trasporta ciascuna unità di massa esattamente al posto giusto, senza che ci sia mai convenienza a scambiarsi i destini. Questa è la traduzione rigorosa dell'osservazione intuitiva di Monge sul non-incrocio delle linee di trasporto.

Teorema 3.4 (Caratterizzazione degli ottimi tramite c-monotonia ciclica).

Sotto le ipotesi del Teorema 3.3, un piano $\gamma \in \Pi(\mu, \nu)$ è ottimale per $K(\mu, \nu)$ se e soltanto se il suo supporto $spt(\gamma) \subset X \times Y$ è c-ciclicamente monotono. Inoltre, γ è ottimale se e soltanto se esistono potenziali duali ottimali (φ, ψ) con $\varphi(x) + \psi(y) = c(x,y)$ per γ-q.o. $(x,y) \in X \times Y$.

Dimostrazione. Mostriamo prima che ogni piano ottimale ha supporto c-ciclicamente monotono. Si supponga per assurdo che esistano $(x_1,y_1), ..., (x_n,y_n)$ nel supporto di γ^* e una permutazione σ per cui $\sum c(x_i, y_{\sigma(i)}) < \sum c(x_i, y_i)$. Per la struttura locale del supporto (ogni punto del supporto può essere approssimato da pianeti finiti), si può costruire un piano $\gamma' \in \Pi(\mu, \nu)$ con $\int c \, d\gamma' < \int c \, d\gamma^*$, contraddicendo l'ottimalità. La costruzione di γ' si effettua rimpiazzando, vicino agli n punti del supporto, il trasporto $(x_i \to y_i)$ con il trasporto permutato $(x_i \to y_{\sigma(i)})$; la consistenza delle marginali è garantita dal fatto che la

permutazione σ conserva le marginali del piano vicino. La direzione reciproca — c-monotonia ciclica implica ottimalità — si prova costruendo i potenziali (φ, ψ) a partire dalla struttura di $\Gamma = \mathrm{spt}(\gamma)$: si fissa un punto $(x_0, y_0) \in \Gamma$ e si definisce $\varphi(x)$ come il minimo su tutte le catene $(x_0 \to y_0 \to x_1 \to y_1 \to \ldots \to x)$ del costo accumulato meno quello eliminato. La c-monotonia ciclica garantisce che questa definizione è ben posta (non dipende dalla catena) e che $(\varphi, \varphi^c) \in \Phi_c$ con $\int \varphi \, d\mu + \int \varphi^c \, d\nu = \int c \, d\gamma$, da cui $D(\mu, \nu) \geq \int c \, d\gamma$ e per la dualità forte $K(\mu, \nu) = \int c \, d\gamma$, ovvero γ è ottimale. □

PARTE II

Geometria degli Spazi di Wasserstein

Capitolo 4 — La Distanza di Wasserstein e le Proprietà Metriche

La distanza di Wasserstein — denominata talvolta distanza di Kantorovich–Rubinstein o, nella tradizione francofona, distanza di Monge–Kantorovich — è la misura di dissomiglianza tra distribuzioni di probabilità che emerge naturalmente come valore ottimale del problema di Kantorovich. La sua definizione incorpora simultaneamente la struttura geometrica dello spazio sottostante (tramite la metrica d) e la struttura probabilistica delle misure (tramite i piani di accoppiamento in $\Pi(\mu, \nu)$), producendo una distanza sensibile alla forma e alla posizione delle distribuzioni e non soltanto alla loro struttura come insiemi di misura. Questa sensibilità geometrica distingue la distanza di Wasserstein da altre distanze tra misure come la variazione totale (che non cattura la geometria dello spazio sottostante) o la divergenza di Kullback–Leibler (che non è una distanza e non è definita quando i supporti sono disgiunti).

4.1 Definizione e Prime Proprietà della Distanza W_p

Per $p \in [1, +\infty)$, si definisce lo spazio delle misure di probabilità con momento p-esimo finito come

$$\mathscr{P}_p(X) := \{ \mu \in \mathscr{P}(X) : \int_X d(x, x_0)^p \, d\mu(x) < \infty \}$$

per un punto base $x_0 \in X$ fissato arbitrariamente. La finitezza del momento non dipende dalla scelta di x_0 perché, per la disuguaglianza triangolare, $d(x, x_0)^p \leq 2^{p-1}(d(x, x_1)^p + d(x_0, x_1)^p)$ e dunque l'integrabilità rispetto a x_0 implica quella rispetto a qualsiasi altro punto x_1. La distanza di Wasserstein di ordine p tra $\mu, \nu \in \mathscr{P}_p(X)$ è

$$W_p(\mu, \nu) := \left(\inf_{\gamma \in \Pi(\mu,\nu)} \int_{X\times Y} d(x,y)^p \, d\gamma(x,y) \right)^{1/p}.$$

Nel caso $p = 2$, la distanza W_2 è strettamente connessa al problema di Monge con costo quadratico; nel caso $p = 1$, ammette la rappresentazione duale di Kantorovich–Rubinstein descritta nel Teorema 4.2. Tanto W_1 quanto W_2 svolgono ruoli centrali nelle applicazioni: W_1 è preferibile nelle stime di stabilità per equazioni di evoluzione con non linearità di tipo conservazione, mentre W_2 è lo strumento naturale per la geometria riemanniana formale degli spazi di Wasserstein.

Teorema 4.1 (Proprietà metriche di W_p).

Per ogni $p \in [1, \infty)$, la funzione W_p è una metrica su $\mathscr{P}_p(X)$. Lo spazio metrico $(\mathscr{P}_p(X), W_p)$ è completo se (X, d) è completo, e separabile se (X, d) è separabile. Inoltre la convergenza $W_p(\mu_n, \mu) \to 0$ è equivalente alla convergenza stretta $\mu_n \rightharpoonup \mu$ più la convergenza del momento di ordine p: $\int d(x, x_0)^p \, d\mu_n \to \int d(x, x_0)^p \, d\mu$.

Dimostrazione. Verifichiamo i tre assiomi di metrica. La simmetria $W_p(\mu, \nu) = W_p(\nu, \mu)$ segue dalla simmetria di $\Pi(\mu, \nu)$: la biiezione $\gamma \mapsto \tilde{\gamma}$ (dove $\tilde{\gamma}(A\times B) = \gamma(B\times A)$) scambia le marginali e preserva il costo (poiché $d(x,y) = d(y,x)$). La separazione dei punti ($W_p(\mu, \nu) = 0 \Leftrightarrow \mu = \nu$) segue dal fatto che $W_p(\mu, \nu) = 0$ implica l'esistenza di un piano γ concentrato sulla diagonale $\{(x,x): x\in X\}$, il che forzando le marginali dà $\mu = \nu$. La disuguaglianza triangolare è la parte non banale e si ottiene tramite il lemma di incollaggio (gluing lemma): dati $\gamma_1 \in \Pi(\mu, \varrho)$ e $\gamma_2 \in \Pi(\varrho, \nu)$ ottimali, si

costruisce la misura incollata $\gamma \in \mathscr{P}(X \times Z \times Y)$ (con $Z = \mathrm{spt}(\varrho)$) e si calcola la proiezione $\hat{\gamma}$ su $X \times Y$. Per la disuguaglianza triangolare di d e la disuguaglianza di Minkowski per integrali, si ha

$$\left(\int d(x,z)^p \, d\gamma(x,z,y)\right)^{1/p} \leq \left(\int d(x,z)^p \, d\gamma_1(x,z)\right)^{1/p} + \left(\int d(z,y)^p \, d\gamma_2(z,y)\right)^{1/p} = W_p(\mu,\rho) + W_p(\rho,\nu),$$

e poiché la proiezione $\hat{\gamma} \in \Pi(\mu, \nu)$ ha costo $\leq \int d(x,y)^p \, d\hat{\gamma} \leq \int (d(x,z)+d(z,y))^p \, d\gamma \leq 2^{p-1}[\int d(x,z)^p \, d\gamma + \int d(z,y)^p \, d\gamma]$, si conclude $W_p(\mu,\nu) \leq W_p(\mu,\varrho) + W_p(\varrho,\nu)$. Per la completezza di $(\mathscr{P}_p(X), W_p)$: sia (μ_n) una successione di Cauchy in W_p. Essa è a fortiori equistretta (poiché è limitata in momento p e la limitatezza in momento implica equistrettezza), dunque per Prokhorov si estrae una sottosuccessione che converge strettamente a $\mu \in \mathscr{P}(X)$. Si verifica che la convergenza è in W_p usando la caratterizzazione tramite convergenza stretta + convergenza del momento.

La separabilità di $(\mathscr{P}_p(X), W_p)$ si ottiene approssimando misure generali con misure a supporto finito razionale, che formano un insieme numerabile denso quando X è separabile. □

4.2 La Dualità di Kantorovich–Rubinstein per W_1

Nel caso $p = 1$, il problema duale di Kantorovich assume una forma particolarmente trasparente. La condizione $\varphi(x) + \psi(y) \leq d(x,y)$ con $\psi = \varphi^c$, per

il costo $c(x,y) = d(x,y)$, diventa equivalente alla condizione $\mathrm{Lip}(\varphi) \leq 1$ sul potenziale φ. Il teorema di dualità di Kantorovich si specializza al seguente risultato, di grande impatto applicativo.

Teorema 4.2 (Dualità di Kantorovich–Rubinstein).

Per $\mu, \nu \in \mathscr{P}_1(X)$ si ha

$$W_1(\mu, \nu) = \sup \{ \int_X \varphi \, d(\mu - \nu) : \varphi : X \to \mathbb{R}, \mathrm{Lip}(\varphi) \leq 1 \},$$

dove $\mathrm{Lip}(\varphi) = \sup_{x \neq y} |\varphi(x) - \varphi(y)| / d(x,y)$ è la costante di Lipschitz di φ.

Dimostrazione. Dal teorema generale di dualità (Teorema 3.3), $W_1(\mu, \nu) = \sup_{(\varphi,\psi) \in \Phi_d} (\int \varphi \, d\mu + \int \psi \, d\nu)$. La condizione di ammissibilità $\varphi(x) + \psi(y) \leq d(x,y)$ implica, prendendo il sup su y, $\varphi(x) \leq d(x,y) - \psi(y)$ per ogni y, da cui $\varphi(x) \leq \varphi^d(x)$. Analogamente $\psi(y) \leq \psi^{\bar{d}}(y)$. Sostituendo $\psi = \varphi^d$ e ottimizzando su φ, si nota che la condizione $\varphi(x) + \varphi^d(y) \leq d(x,y)$, ovvero $\inf_z \{d(z,y) - \varphi(z)\} + \varphi(x) \leq d(x,y)$, vale se e soltanto se $\varphi(x) - \varphi(z) \leq d(x,z)$ per ogni x, z, cioè $\mathrm{Lip}(\varphi) \leq 1$. Dunque il duale si riscrive come il sup su 1-Lipschitz di $\int \varphi \, d\mu + \int \varphi^d \, d\nu = \int \varphi \, d\mu - \int \varphi \, d\nu + \text{cost.}$, dove il termine cost. non dipende da φ e si cancella ottimizzando, producendo la formula di Kantorovich–Rubinstein. □

La dualità di Kantorovich–Rubinstein ha importanti implicazioni computazionali. In particolare, per misure discrete $\mu_N := (1/N)\sum_{i=1}^N \delta_{x_i}$, la distanza $W_1(\mu_N, \nu)$ può essere calcolata risolvendo un programma lineare su $\mathbb{R}^N$, e le reti neurali con vincolo di Lipschitz (implementato tramite clipping, penalizzazione del gradiente o normalizzazione spettrale) forniscono approssimatori della funzione 1-Lipschitz ottimale nella rappresentazione duale. Questa osservazione è il fondamento teorico dei Wasserstein GAN, analizzati nel Capitolo 8.

Una conseguenza bella della dualità di Kantorovich–Rubinstein è che W_1 metrizza la topologia della convergenza stretta su $\mathscr{P}_1(X)$ qualora X sia compatto. Infatti, $\mu_n \rightharpoonup \mu$ se e soltanto se $W_1(\mu_n, \mu) \to 0$: la direzione ($\Rightarrow$) è immediata dalla formula duale (ogni f 1-Lipschitz è in $C_b(X)$), e la direzione ($\Leftarrow$) segue dall'approssimazione di ogni $f \in C_b(X)$ da funzioni Lipschitz tramite il modulo di continuità e dalla compattezza di X.

4.3 Confronto tra Distanze di Wasserstein e Topologia

Le distanze W_p per diversi valori di p sono comparabili sugli spazi compatti e gerarchicamente ordinate sugli spazi generali. Per $1 \le p \le q < \infty$ e ogni $\mu, \nu \in \mathscr{P}_q(X)$, la disuguaglianza di Jensen applicata alla funzione concava $t \mapsto t^{p/q}$ dà

$$W_p(\mu, \nu) \le W_q(\mu, \nu).$$

La dimostrazione è la seguente: sia γ^* ottimale per W_q. Allora

$$W_p^p(\mu, \nu) \le \int d(x,y)^p \, d\gamma^* \le \left(\int d(x,y)^q \, d\gamma^*\right)^{p/q} = W_q^p(\mu, \nu)$$

dove il secondo passaggio è la disuguaglianza di Jensen (o di Hölder con esponenti q/p e $q/(q-p)$). Su uno spazio compatto di diametro D, vale anche la disuguaglianza inversa $W_q \le D^{1-p/q} \cdot W_p^{p/q}$, che rende equivalenti tutte le distanze di Wasserstein nell'ambito dei compatti.

La caratterizzazione della convergenza in W_p è il contenuto del Teorema 4.1: $W_p(\mu_n, \mu) \to 0$ se e soltanto se $\mu_n \rightharpoonup \mu$ (convergenza stretta) e $\int d^p \, d\mu_n \to \int d^p \, d\mu$ (convergenza del momento p-esimo). In termini pratici, la convergenza in W_p è più forte della convergenza stretta: richiede non solo che le misure convergano nella topologia debole, ma anche che i loro momenti p-esimi non fuggano all'infinito. Un esempio istruttivo: se $\mu_n := (1-1/n)\delta_0 + (1/n)\delta_{n^2}$, allora $\mu_n \rightharpoonup \delta_0$ strettamente (perché per ogni $f \in C_b(\mathbb{R})$, $\int f$

$d\mu_n = (1-1/n)f(0) + (1/n)f(n^2) \to f(0) = \int f \, d\delta_0$), ma $W_p(\mu_n, \delta_0) = (1/n)^{1/p} \cdot n^2 = n^{2-1/p} \to +\infty$ per $p \geq 1$. La massa che fugge all'infinito fa divergere la distanza di Wasserstein pur non alterando la convergenza stretta.

Capitolo 5 — Geodetiche nello Spazio di Wasserstein e Interpolazione di McCann

Una delle proprietà geometriche più belle degli spazi di Wasserstein è la loro struttura di spazi geodetici: ogni coppia di misure μ_0 e μ_1 può essere connessa da un cammino di lunghezza minima nello spazio $(\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n), W_2)$, e tale cammino ha una descrizione esplicita in termini del piano di trasporto ottimale tra μ_0 e μ_1. Questo risultato, dimostrato da Robert McCann nel 1997, costituisce il punto di partenza per l'analisi funzionale sugli spazi di Wasserstein, per la teoria dei flussi gradiente di Jordan–Kinderlehrer–Otto, e per la comprensione geometrica profonda della convessità displacement.

5.1 Curve Assolutamente Continue e Derivata Metrica

Prima di enunciare il teorema di McCann, è utile precisare la nozione di geodetica e il concetto di curva assolutamente continua in uno spazio metrico generico (M, δ). Una curva $\gamma : [0,1] \to M$ si dice assolutamente continua se esiste $g \in L^1([0,1])$ tale che $\delta(\gamma(s), \gamma(t)) \leq \int_s^t g(r)\, dr$ per ogni $s \leq t$. La funzione g è una velocità superiore per la curva. La velocità metrica (o derivata metrica) di γ nel punto t è definita come

$$|\gamma'|(t) := \lim_{h \to 0} \delta(\gamma(t+h), \gamma(t)) / |h|,$$

e si dimostra che questo limite esiste L^1-q.o. per ogni curva assolutamente continua, che $|\gamma'|(\cdot) \in L^1([0,1])$, e che $|\gamma'|$ è la velocità minima nel senso che $g \geq |\gamma'|$ q.o. per ogni velocità superiore g. La lunghezza della curva è $L(\gamma) = \int_0^1 |\gamma'|(t)\, dt$, e una geodetica è una curva assolutamente continua con $L(\gamma) = \delta(\gamma(0), \gamma(1))$ parametrizzata a velocità costante ($|\gamma'|(t) \equiv \delta(\gamma(0), \gamma(1))$ per q.o. t). Nello spazio $(\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n), W_2)$, le

curve assolutamente continue hanno una caratterizzazione analitica precisa tramite l'equazione di continuità. Questo è il contenuto del teorema di Ambrosio–Gigli–Savaré, che identifica le curve assolutamente continue in $\mathscr{P}_2$ con le soluzioni distribuzionali dell'equazione di continuità.

Teorema 5.1 (Ambrosio–Gigli–Savaré — Curve AC in $\mathscr{P}_2$).

Una curva $t \mapsto \mu_t \in \mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$ per $t \in [0,1]$ è assolutamente continua rispetto a W_2 con derivata metrica $|\mu'|(t) \in L^2([0,1])$ se e soltanto se esiste un campo di vettori di Borel $v_t : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, con $\int_0^1 \int |v_t|^2 \, d\mu_t \, dt < \infty$, tale che la coppia (μ_t, v_t) soddisfa l'equazione di continuità in senso distribuzionale:

$$\partial_t \mu_t + \nabla \cdot (\mu_t v_t) = 0 \quad \text{in } (0,1) \times \mathbb{R}^n.$$

Inoltre, la derivata metrica soddisfa $|\mu'|(t) = \|v_t\|_{L^2(\mu_t)} := (\int |v_t|^2 \, d\mu_t)^{1/2}$ per q.o. t, e v_t è il campo di velocità di norma minima tra tutti i campi che soddisfano l'equazione di continuità con densità μ_t.

Questo teorema di rappresentazione è di importanza capitale: afferma che le curve assolutamente continue in $\mathscr{P}_2$ sono esattamente le soluzioni dell'equazione di conservazione della massa con velocità di quadrato integrabile, e che la velocità metrica è la norma L^2 del campo di velocità ottimale. La derivata metrica ha dunque un significato fisico preciso: è l'energia cinetica per unità di massa della distribuzione in movimento.

5.2 Il Teorema di McCann: Interpolazione per Spostamento

Teorema 5.2 (McCann, 1997).

Siano $\mu_0, \mu_1 \in \mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$ con $\mu_0 \ll L^n$, e sia $T = \nabla\varphi$ la mappa di Brenier ottimale da μ_0 a μ_1. Per ogni $t \in [0,1]$ si definisca la mappa interpolante $T_t := (1 - t) \cdot id + t \cdot \nabla\varphi$ e la misura interpolante $\mu_t := (T_t)_{\#}\mu_0$. Allora:

(i) $t \mapsto \mu_t$ è la geodetica a velocità costante in $(\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n), W_2)$ da μ_0 a μ_1.

(ii) $W_2(\mu_s, \mu_t) = |t - s| \cdot W_2(\mu_0, \mu_1)$ per ogni $s, t \in [0,1]$.

(iii) Se $\mu_0 \ll L^n$, allora $\mu_t \ll L^n$ per ogni $t \in [0,1)$, con densità $f_t(y) = f_0(T_t^{-1}(y)) / \det(\nabla T_t(T_t^{-1}(y)))$.

(iv) Il campo di velocità della geodetica è $v_t = (\nabla\varphi - id) \circ T_t^{-1}$, che è il gradiente del potenziale $\psi_t(y) = (1/2)|y|^2 - \varphi_t^*(y)$ con φ_t convessa.

Dimostrazione. Dimostriamo (ii), che implica (i). Per ogni $s, t \in [0,1]$ si ha $T_t - T_s = (t-s)(\nabla\varphi - id)$, dunque la mappa $M_{s,t} := T_t \circ T_s^{-1}$ soddisfa $(M_{s,t})_{\#}\mu_s = \mu_t$ ed è ammissibile. Calcolando il costo:

$W_2^2(\mu_s, \mu_t) \leq \int |T_t(x) - T_s(x)|^2 \, d\mu_0(x) = (t-s)^2 \int |\nabla\varphi(x) - x|^2 \, d\mu_0(x) = (t-s)^2 W_2^2(\mu_0, \mu_1)$.

Ciò dà $W_2(\mu_s, \mu_t) \leq |t-s| \, W_2(\mu_0, \mu_1)$. Per l'uguaglianza, si usa la disuguaglianza triangolare: $W_2(\mu_0, \mu_1) \leq W_2(\mu_0, \mu_s) + W_2(\mu_s, \mu_t) + W_2(\mu_t, \mu_1) \leq (s + |t-s| + (1-t)) \, W_2(\mu_0, \mu_1) = W_2(\mu_0, \mu_1)$. Dunque tutti i disuguaglianze nella catena sono uguaglianze, il che implica $W_2(\mu_s, \mu_t) = |t-s| \, W_2(\mu_0, \mu_1)$. Per la (iii): $T_t = (1-t)id +$

$t\nabla\varphi = id + t(\nabla\varphi - id)$. Poiché $\nabla\varphi$ è il gradiente di una funzione convessa, la matrice jacobiana $\nabla T_t = (1-t)I + t\nabla^2\varphi$ è la media convessa dell'identità (definita positiva) e di $\nabla^2\varphi$ (semidefinita positiva per Aleksandrov), dunque è definita positiva per $t < 1$. La formula per la densità di μ_t segue dalla formula di cambio di variabili (1.7): $f_t(y) = f_0(T_t^{-1}(y)) / \det(\nabla T_t(T_t^{-1}(y)))$.□

5.3 La Formula di Benamou–Brenier

Nel 2000 Benamou e Brenier dimostrarono una rappresentazione variazionale di W_2 in termini di flussi di velocità — un risultato che trasforma il problema statico del trasporto ottimale in un problema dinamico di controllo ottimo su campi di vettori. Questo punto di vista dinamico è essenziale nell'analisi numerica (la cosiddetta formulazione fluida del trasporto ottimale) e stabilisce il collegamento fondamentale tra il trasporto ottimale e le equazioni alle derivate parziali.

Teorema 5.3 (Benamou–Brenier).

Per $\mu_0, \mu_1 \in \mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$ si ha

$$W_2^2(\mu_0, \mu_1) = \inf \left\{ \int_0^1 \int_{\mathbb{R}^n} |v_t(x)|^2 \, d\mu_t(x)\, dt \right\}$$

dove l'infimo è preso su tutte le coppie $(\mu_t, v_t)_{t\in[0,1]}$ con $\mu_t \in \mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$ e $v_t : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ campo di Borel tali che (μ_t, v_t) soddisfi l'equazione di continuità $\partial_t\mu_t + \nabla\cdot(\mu_t v_t) = 0$ in senso distribuzionale con μ_0 e μ_1 come dati iniziale e finale.

Dimostrazione. La disuguaglianza $W_2^2 \leq \inf$ BBF segue dal fatto che il cammino di McCann $t \mapsto \mu_t$, con campo di velocità $v_t =$

$(\nabla\varphi - \mathrm{id}) \circ T_t^{-1}$, soddisfa l'equazione di continuità (verifica diretta per derivazione della formula $\mu_t = (T_t)_{\#}\mu_0$) e ha costo $\int_0^1 \int |v_t|^2 \, d\mu_t \, dt = W_2^2(\mu_0, \mu_1)$ (calcolo diretto usando la formula per la variata metrica del Teorema 5.1 e la struttura affine di T_t). Per la disuguaglianza inversa, si considera una coppia generica (μ_t, v_t) ammissibile e si stima il costo del piano γ ottenuto dalla legge del processo di trasporto: integrando v_t lungo le caratteristiche, si costruisce $\gamma \in \Pi(\mu_0, \mu_1)$ con $\int d^2 \, d\gamma \leq \int_0^1 \int |v_t|^2 \, d\mu_t \, dt$, dove l'ultima disuguaglianza segue dalla disuguaglianza di Jensen (la lunghezza di un cammino non è superiore all'integrale della velocità). Dunque $W_2^2 \leq \int d^2 \, d\gamma \leq \int |v_t|^2 \, d\mu_t \, dt$. □

La formula di Benamou–Brenier ha un'interpretazione fisica bellissima: W_2 è la radice quadrata dell'energia cinetica minima necessaria per trasportare la distribuzione μ_0 nella distribuzione μ_1 in tempo unitario, dove l'energia cinetica al tempo t di una distribuzione di densità μ_t con campo di velocità v_t è $(1/2)\int |v_t|^2 \, d\mu_t$. Questa è esattamente l'energia cinetica di un fluido ideale (incomprimibile o meno) in meccanica dei fluidi. La connessione con le equazioni di Euler incomprimibili è profonda: la soluzione di Otto–Villani al problema di Arnold (le geodetiche del gruppo dei diffeomorfismi volume-preservanti come soluzioni delle equazioni di Euler) è un caso limite della formula di Benamou–Brenier.

Il minimo in (5.3) è raggiunto dal cammino geodetico μ_t di McCann con campo di velocità $v_t = (\nabla\varphi - \mathrm{id}) \circ T_t^{-1}$. In corrispondenza del minimo, v_t è un campo potenziale (gradiente) per ogni t, e soddisfa l'equazione di Hamilton–Jacobi senza viscosità $\partial_t\psi_t + (1/2)|\nabla\psi_t|^2 = 0$, dove ψ_t è tale che $v_t = \nabla\psi_t$. Questo sistema

accoppiato di equazione di continuità e Hamilton–Jacobi è il sistema delle caratteristiche associato alle geodetiche in $\mathscr{P}_2$.

5.4 Il Calcolo di Otto: Struttura Riemanniana Formale

Nel 2001 Felix Otto propose una struttura riemanniana formale sullo spazio $\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$ che giustifica a posteriori il linguaggio geometrico usato nel seguito e fornisce una guida euristica di straordinaria potenza. Questa struttura non è rigorosa nel senso della geometria differenziale classica — $\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$ non è una varietà di Banach, né di Hilbert, e la nozione di vettore tangente richiede una trattazione delicata — ma, una volta stabiliti i teoremi rigorosi, essa fornisce un'intuizione geometrica che guida la scoperta di risultati altrimenti difficilmente immaginabili.

Lo spazio tangente formale $T_\mu\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$ in un punto μ viene identificato con la chiusura in $L^2(\mu; \mathbb{R}^n)$ dell'insieme dei gradienti di funzioni lisce a supporto compatto:

$$T_\mu\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n) := cl_{L^2(\mu)}\{ \nabla\xi : \xi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n) \}.$$

La metrica riemanniana in μ viene definita tramite il prodotto interno in $L^2(\mu)$:

$$\langle\nabla\xi_1, \nabla\xi_2\rangle_\mu := \int_{\mathbb{R}^n} \nabla\xi_1(x) \cdot \nabla\xi_2(x)\, d\mu(x).$$

Con questa struttura, la distanza geodetica tra due punti di $\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$ calcolata tramite la metrica riemanniana (5.6) coincide con W_2, confermando la coerenza del formalismo. Il calcolo di Otto fornisce poi le formule esplicite per gli oggetti geometrici su $\mathscr{P}_2$: il gradiente riemanniano di un funzionale $F : \mathscr{P}_2 \to \mathbb{R}$, la connessione di Levi–Cività (in modo

formale), e la curvatura sezionale (in modo ancora più formale, legata alle disuguaglianze di distanza stimate da Lott–Villani e Sturm).

Il gradiente riemanniano di Wasserstein di un funzionale $F : \mathscr{P}_2 \to \mathbb{R}$ è l'elemento $\mathrm{grad}_W F(\mu)$ di $T_\mu \mathscr{P}_2$ tale che, per ogni $\nabla\xi \in T_\mu \mathscr{P}_2$,

$$\langle \mathrm{grad}_W F(\mu), \nabla\xi \rangle_\mu = d/dt|_{t=0} F((Id + t\nabla\xi)_{\#}\mu).$$

Usando l'equazione di continuità linearizzata $\partial_t \mu_t = -\nabla\cdot(\mu\ \nabla\xi)$ (che governa la variazione di $(Id + t\nabla\xi)_{\#}\mu$ al primo ordine in t), si ottiene per integrazione per parti che il gradiente di Wasserstein del funzionale di entropia relativa $H(\mu|\rho) = \int (d\mu/d\rho) \log(d\mu/d\rho)\, d\rho$ è

$$\mathrm{grad}_W H(\mu|\rho) = -\nabla \log(d\mu/d\rho) = \nabla \log \rho - \nabla \log \mu.$$

Il flusso gradiente di Wasserstein dell'entropia relativa rispetto a $\rho = e^{-V} L^n$ soddisfa dunque l'equazione $\partial_t \mu_t = \nabla\cdot(\mu_t\ \nabla \log(\mu_t/\rho)) = \Delta\mu_t + \nabla\cdot(\mu_t\ \nabla V)$, che è esattamente l'equazione di Fokker–Planck con potenziale V. Questo calcolo, che può essere reso rigoroso nel contesto della teoria dei flussi gradiente in spazi metrici di Ambrosio–Gigli–Savaré, stabilisce il collegamento profondo tra il trasporto ottimale e la teoria delle equazioni di diffusione non lineare.

PARTE III

L'Equazione di Monge–Ampère e la Regolarità

Capitolo 6 — L'Equazione di Monge–Ampère e la Teoria di Caffarelli

Quando le misure $\mu = f \cdot L^n$ e $\nu = g \cdot L^n$ sono assolutamente continue con densità f e g, la mappa di Brenier $T = \nabla\varphi$ tra μ e ν soddisfa, formalmente, un'equazione alle derivate parziali di tipo Monge–Ampère. Questa equazione, nella sua formulazione rigorosa, è una PDE pienamente nonlineare del secondo ordine: la sua nonlinearità è del tipo determinante (si calcola il determinante della matrice hessiana), il che la rende strutturalmente diversa dalle equazioni ellittiche semilineari standard. L'analisi della regolarità delle sue soluzioni ha impegnato matematici di prima grandezza per decenni, e il contributo decisivo è dovuto a Luis Caffarelli, i cui teoremi degli anni 1990–1992 hanno trasformato l'equazione di Monge–Ampère in uno strumento analitico di elevata precisione.

6.1 Derivazione dell'Equazione dal Problema di Trasporto

Sia $T = \nabla\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ la mappa di Brenier, con $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ convessa. Dalla formula di cambio di variabili (1.7) applicata a T e alla coppia $(\mu, \nu) = (f \cdot L^n, g \cdot L^n)$, la condizione $T_{\#}\mu = \nu$ si traduce nel seguente modo: per ogni boreliano $B \subset \mathbb{R}^n$,

$$\int_B g(y)\, dy = \nu(B) = \mu(T^{-1}(B)) = \mu((\nabla\varphi)^{-1}(B)) = \int_{(\nabla\varphi)^{-1}(B)} f(x)\, dx.$$

Applicando la formula di cambio di variabili con la sostituzione $y = \nabla\varphi(x)$ (che è un diffeomorfismo L^n-q.o. quando φ è convessa con hessiana non singolare), si ottiene

$$\int_B g(\nabla\varphi(x))\, |\det \nabla^2\varphi(x)|\, dx = \int_B f(x)\, dx$$

per ogni boreliano B, da cui la relazione puntuale (valida L^n-q.o.):

$$f(x) = g(\nabla\varphi(x)) \cdot \det \nabla^2\varphi(x).$$

Poiché φ è convessa, la matrice hessiana $\nabla^2\varphi(x)$ è semidefinita positiva L^n-q.o. (per il teorema di Aleksandrov), e dunque $\det \nabla^2\varphi(x) \geq 0$. L'equazione diventa quindi l'equazione di Monge–Ampère:

$$\det \nabla^2\varphi(x) = f(x) / g(\nabla \varphi(x)) \quad \text{per q.o. } x \in \mathbb{R}^n.$$

Questa è una PDE scalare del secondo ordine per la funzione convessa φ, con dato al bordo implicito nella condizione $T_{\#}(f \cdot L^n) = g \cdot L^n$. Nel caso $n = 1$, l'equazione di Monge–Ampère si riduce a $\varphi''(x) = f(x)/g(\varphi'(x))$, che è un'equazione differenziale ordinaria del secondo ordine per φ. Nel caso $n \geq 2$, il determinante della hessiana è un polinomio di grado n nelle derivate seconde di φ, e l'equazione è genuinamente nonlineare.

La struttura ellittica dell'equazione di Monge–Ampère merita un commento. Fissata una soluzione liscia φ_0 con $\nabla^2\varphi_0(x_0) = A_0 > 0$, la linearizzazione di $\det \nabla^2\varphi$ attorno a φ_0 è:

$$\frac{d}{d\varepsilon}\Big|_{\varepsilon=0} \det(\nabla^2(\varphi_0 + \varepsilon u)) = \det(A_0) \cdot \operatorname{tr}(A_0^{-1} \nabla^2 u) = \sum_{i,j} C_{ij}(A_0)\, \partial^2_{ij} u,$$

dove $C_{ij}(A_0) = \det(A_0) \cdot (A_0^{-1})_{ji}$ sono i cofattori di A_0. La matrice dei cofattori $C(A_0)$ è simmetrica e definita positiva quando A_0 è definita positiva (poiché $C(A) = \det(A)\, A^{-T}$), il che afferma che l'equazione di Monge–Ampère è ellittica attorno a qualsiasi soluzione liscia con hessiana strettamente positiva. La degenerazione dell'ellitticità avviene quando $\nabla^2\varphi$ diventa singolare, e è questa degenerazione la sorgente delle principali difficoltà analitiche.

6.2 Soluzioni nel Senso di Aleksandrov e Misure di Monge–Ampère

La nozione classica di soluzione (funzione C^2 che soddisfi l'equazione puntualmente) è troppo restrittiva: esistono situazioni geometricamente naturali in cui la soluzione non è liscia. Aleksandrov

introdusse nel 1958 la nozione di soluzione generalizzata che porta il suo nome, basata sul sottodifferenziale della funzione convessa.

Per una funzione convessa $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ e un insieme boreliano $E \subset \mathbb{R}^n$, il sottodifferenziale immagine $\partial\varphi(E)$ è l'insieme dei vettori di subdifferenziale su E:

$$\partial\varphi(E) := \cup_\{x \in E\}\ \partial\varphi(x) = \cup_\{x \in E\}\ \{\, p \in \mathbb{R}^n : \varphi(y) \geq \varphi(x) + p \cdot (y - x) \text{ per ogni } y \,\}.$$

La misura di Monge–Ampère associata a φ è la misura di Borel $\mu[\varphi]$ definita da $\mu[\varphi](E) = L^n(\partial\varphi(E))$. Per verificare che questa è effettivamente una misura, si osserva che la mappa $E \mapsto \partial\varphi(E)$ è una corrispondenza multivalore misurabile (poiché φ è convessa e quindi semicontinua inferiormente) e che L^n è σ-additiva. Per una funzione convessa liscia con $\nabla^2\varphi$ > 0, si ha $\partial\varphi(E) = \nabla\varphi(E)$ e $\mu[\varphi](E) = \int_E \det \nabla^2\varphi\, dx$ per il cambio di variabili, confermando la consistenza con la formulazione puntuale. Una funzione convessa φ è soluzione di Aleksandrov dell'equazione $\det \nabla^2\varphi = h$ se e soltanto se $\mu[\varphi] = h \cdot L^n$, ossia se $L^n(\partial\varphi(E)) = \int_E h(x)\, dx$ per ogni boreliano E.

L'esistenza di soluzioni di Aleksandrov per dati h non negativi e integrabili è garantita da un teorema di Aleksandrov del 1958, che si basa sulla costruzione di una successione di soluzioni discrete (funzioni convesse affini a tratti) e sul passaggio al limite tramite compattezza nella topologia delle funzioni convesse. Nel contesto del trasporto ottimale, l'esistenza della soluzione di Aleksandrov corrisponde esattamente all'esistenza della mappa di Brenier $\nabla\varphi$: la mappa di Brenier esiste (Teorema 2.1) e la sua funzione potenziale φ è la soluzione di Aleksandrov corrispondente.

6.3 I Teoremi di Regolarità di Caffarelli

La teoria della regolarità di Caffarelli afferma che, sotto ipotesi appropriate di limitatezza e non-degenerazione sui dati f e g, la soluzione

di Aleksandrov φ è automaticamente liscia. Il punto di partenza è la stima C^{1,α}, poi raffinata a C^{2,α} e ulteriormente a C^{k+2,α} per dati lisci. Lo strumento tecnico fondamentale è il lemma delle sezioni, che controlla la forma geometrica degli insiemi di sub-livello di φ.

Una sezione di φ centrata in x_0 al livello h > 0 è l'insieme di sub-livello della funzione traslata:

$$S_h(x_0) := \{ x \in \mathbb{R}^n : \varphi(x) < \varphi(x_0) + \nabla\varphi(x_0) \cdot (x - x_0) + h \},$$

ossia l'insieme dei punti che si trovano al di sotto dell'iperpiano tangente di φ in x_0 sollevato di h. Le sezioni sono insiemi convessi (perché φ è convessa), aperti e limitati. Caffarelli dimostrò che, sotto le ipotesi $0 < \lambda \leq f, g \leq \Lambda < \infty$ e spt(v) convesso, le sezioni di φ sono uniformemente rotonde nel senso seguente: esistono costanti c_1, c_2 > 0 (dipendenti solo da n, λ, Λ) tali che, per ogni x_0 nel supporto di μ e ogni h piccolo, esiste un ellissoide E con volume h^{n/2} e

$$c_1 E \subset S_h(x_0) - x_0 \subset c_2 E.$$

Questa proprietà di forma controllata delle sezioni (la sezione non può essere troppo allungata) è il nucleo geometrico della teoria. Da essa si deducono le stime di regolarità:

Teorema 6.1 (Caffarelli, 1992 — Regolarità C^{1,α}).

Siano $f, g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ funzioni misurabili con $0 < \lambda \leq f, g \leq \Lambda < \infty$ q.o., e si supponga che $spt(v) = spt(g \cdot L^n)$ sia un insieme convesso. Allora la soluzione di Aleksandrov φ dell'equazione $\det \nabla^2\varphi = f/g(\nabla\varphi)$ appartiene alla classe $C^{1,\alpha}_{loc}$ per un certo esponente $\alpha = \alpha(n, \lambda, \Lambda)$ > 0. In particolare, la mappa di Brenier $T = \nabla\varphi$ è hölderiana con esponente α.

Teorema 6.2 (Caffarelli — Regolarità C^{k+2,α} per dati lisci).

Se $f, g \in C^{k,\alpha}(\mathbb{R}^n)$ per qualche $k \geq 0$ e $\alpha \in (0,1)$, con $0 < \lambda \leq f, g \leq \Lambda$, e spt(ν) è convesso con bordo $C^{k+2,\alpha}$, allora $\varphi \in C^{k+2,\alpha}_{loc}$ e la mappa $T = \nabla\varphi$ è un $C^{k+1,\alpha}_{loc}$-diffeomorfismo. In particolare, per $f, g \in C^\infty$ e spt(ν) con bordo liscio, la mappa di Brenier è un diffeomorfismo liscio.

La convessità del supporto di ν è una condizione essenziale: senza di essa, la regolarità può fallire anche per dati lisci. Un contro-esempio elementare in due dimensioni si costruisce prendendo ν concentrata su un anello (dominio non convesso): in questo caso la mappa di Brenier può avere singolarità in $\nabla\varphi$ pur con f e g lisce e strettamente positive. La condizione di convessità garantisce che il sottodifferenziale di φ rimanga contenuto nel supporto di ν, prevenendo la formazione di regioni dove la mappa non è definita in modo liscio.

La dimostrazione del Teorema 6.1 procede per comparazione con soluzioni esplicite dell'equazione di Monge–Ampère su ellissoidi. Il Lemma delle Sezioni afferma che, dopo una trasformazione lineare normalizzante (che porta la sezione $S_1(x_0)$ a una palla di raggio unitario), l'equazione di Monge–Ampère normalizzata ha un operatore ellittico con coefficienti uniformemente limitati, e si può applicare la teoria della regolarità per operatori ellittici uniformi di Krylov–Safonov–Evans per concludere la stima $C^{1,\alpha}$.

PARTE IV

Regolarizzazione Entropica, Algoritmo di Sinkhorn e Applicazioni

Capitolo 7 — Il Problema di Schrödinger e la Regolarizzazione Entropica

Il calcolo diretto del piano ottimale di Kantorovich è, dal punto di vista computazionale, un problema di programmazione lineare in dimensione molto elevata: se μ e ν sono approssimate da misure discrete con N atomi ciascuna, il problema ha N^2 variabili e 2N vincoli di marginalità, e la sua risoluzione tramite il simplesso o i metodi del punto interno scala come $O(N^3 \log N)$ in tempo e $O(N^2)$ in memoria. Per le applicazioni moderne, dove N può essere dell'ordine di 10^6 o superiore, questa complessità è del tutto proibitiva. La regolarizzazione entropica, proposta nella forma moderna da Cuturi nel 2013 e collegata a un problema classico di Schrödinger degli anni 1931–1932, abbassa la complessità computazionale a $O(N^2/\varepsilon^2)$ — con un risparmio di un fattore N/ε^2 rispetto al simplesso — mantenendo le principali proprietà geometriche della distanza di Wasserstein e ammettendo parallelizzazione efficiente su GPU.

7.1 Il Problema di Schrödinger

Nel 1931–1932 Erwin Schrödinger posé il seguente problema di inferenza statistica per processi di diffusione: dato un gran numero N di particelle browniane indipendenti che all'istante $t = 0$ hanno distribuzione empirica μ e all'istante $t = 1$ si osserva che hanno distribuzione empirica ν (evento di probabilità esponenzialmente piccola in N per la legge dei grandi numeri, dunque un evento di grande informazione), qual è la legge di processo più probabile compatibile con queste osservazioni? Per il

principio di minima azione nell'inferenza bayesiana (che corrisponde alla massimizzazione della verosimiglianza sotto vincoli), la risposta è la legge di processo che minimizza la divergenza di Kullback–Leibler dalla legge di riferimento (il moto browniano standard) tra tutti i processi con le marginali temporali prescritte.

Nel linguaggio dei piani di trasporto (identificando ogni processo con la sua legge su coppie di posizioni iniziali-finali), il problema di Schrödinger è:

$$\min_{\gamma \in \Pi(\mu,\nu)} KL(\gamma \mid R) := \min_{\gamma \in \Pi(\mu,\nu)} \int_{X\times Y} \log(d\gamma/dR)\, d\gamma,$$

dove $R \in \mathscr{P}(X \times Y)$ è la misura di riferimento (tipicamente il piano prodotto del nucleo del calore: $R(dx, dy) = K^T(x, dy)\, d\mu(x)$ dove $K^T(x, \cdot)$ è la distribuzione gaussiana centrata in x con varianza T). Quando $R = e^{-c/\varepsilon} \cdot (\mu \otimes \nu)$ per un parametro di regolarizzazione ε > 0 e una funzione di costo c, il problema di Schrödinger si riscrive come il problema di trasporto ottimale con regolarizzazione entropica:

$$OT_\varepsilon(\mu, \nu) := \min_{\gamma \in \Pi(\mu,\nu)} \{ \int_{X\times Y} c\, d\gamma + \varepsilon \cdot KL(\gamma \mid \mu\otimes\nu) \}.$$

Il termine $\varepsilon \cdot KL(\gamma \mid \mu\otimes\nu) = \varepsilon \int \log(d\gamma/d(\mu\otimes\nu))\, d\gamma$ è la penalizzazione entropica: premia i piani γ vicini al piano prodotto $\mu\otimes\nu$ (che corrisponde all'indipendenza tra le marginali) e penalizza i piani concentrati (che corrispondono a un trasporto deterministico, cioè a una mappa). Al crescere di ε, la soluzione si avvicina al piano prodotto $\mu\otimes\nu$; al decrescere di ε verso zero, la soluzione di (7.2) converge al piano ottimale di Kantorovich per (3.2). Questa convergenza è quantificata dal Teorema 7.1 della monografia originale.

Un fatto importante: per ogni ε > 0, il problema (7.2) ha un'unica soluzione (grazie alla stretta convessità della divergenza KL), mentre il problema di Kantorovich può avere più soluzioni. La regolarizzazione entropica seleziona,

tra tutti i piani ottimali di Kantorovich, quello di entropia massimale rispetto a $\mu \otimes \nu$.

7.2 Struttura della Soluzione: Il Nucleo di Gibbs

La struttura della soluzione ottimale γ_ε del problema (7.2) è determinata dalle condizioni di ottimalità di Karush–Kuhn–Tucker, che in questo contesto di ottimizzazione convessa in dimensione infinita si esprimono tramite i potenziali duali di Schrödinger.

Proposizione 7.1 (Struttura del piano ottimale entropico).

L'unica soluzione di $OT_\varepsilon(\mu, \nu)$ ha la forma

$$d\gamma_\varepsilon(x,y) = \exp\left((\varphi_\varepsilon(x) + \psi_\varepsilon(y) - c(x,y)) / \varepsilon \right) \cdot d(\mu \otimes \nu)(x,y),$$

per una coppia di funzioni misurabili $(\varphi_\varepsilon, \psi_\varepsilon)$ — dette potenziali di Schrödinger — unicamente determinate a meno di una costante additiva. Le condizioni di marginalità $\gamma_\varepsilon \in \Pi(\mu, \nu)$ si traducono nel sistema accoppiato (equazioni di Schrödinger):

$$\exp(\varphi_\varepsilon(x)/\varepsilon) \cdot \int_Y \exp\left((\psi_\varepsilon(y) - c(x,y))/\varepsilon \right) d\nu(y) = 1 \quad \mu\text{-q.o.}$$

$$\exp(\psi_\varepsilon(y)/\varepsilon) \cdot \int_X \exp\left((\varphi_\varepsilon(x) - c(x,y))/\varepsilon \right) d\mu(x) = 1 \quad \nu\text{-q.o.}$$

Dimostrazione. Scriviamo le condizioni di KKT per il problema OT_ε. Il funzionale $F(\gamma) = \int c \, d\gamma + \varepsilon \, KL(\gamma|\mu \otimes \nu)$ è strettamente convesso e differenziabile in $L^1(\mu \otimes \nu)$. Il gradiente è $\delta F/\delta\gamma = c(x,y) + \varepsilon(1 + \log(d\gamma/d(\mu \otimes \nu)))$. Al minimo vincolato γ^*, il gradiente deve essere costante sulle fibre del vincolo di marginalità, ovvero ci devono essere moltiplicatori $\lambda(x)$ e $\rho(y)$ tali che $c(x,y) + \varepsilon \log(d\gamma^*/d(\mu \otimes \nu)) = \lambda(x) + \rho(y)$ per γ^*-q.o. (x,y). Ponendo $\varphi_\varepsilon(x) = \lambda(x)$ e $\psi_\varepsilon(y) = \rho(y)$ e risolvendo per $d\gamma^*/d(\mu \otimes \nu)$ si ottiene la formula della proposizione. Le equazioni di

Schrödinger sono la riscrittura della condizione di marginalità in termini dei potenziali. □

7.3 L'Algoritmo di Sinkhorn: Derivazione, Stabilizzazione Numerica e Convergenza

Il sistema (7.5)–(7.6) per i potenziali di Schrödinger si presta a un metodo iterativo elementare: l'algoritmo di Sinkhorn, originariamente concepito da Richard Sinkhorn nel 1967 come metodo per la normalizzazione di matrici positive a doppie somme unitarie (problema di Sinkhorn–Knopp). Nel contesto del trasporto ottimale entropico, l'algoritmo si formula come segue. Si pongono $u^{(0)} \equiv 1$ e, per $k = 0, 1, 2, \ldots$:

$$v^{(k)}(y) := 1 / \int_X K(x,y) \cdot u^{(k)}(x)\, d\mu(x)$$

$$u^{(k+1)}(x) := 1 / \int_Y K(x,y) \cdot v^{(k)}(y)\, d\nu(y)$$

dove $K(x, y) = \exp(-c(x,y)/\varepsilon)$ è il nucleo di Gibbs. Le funzioni u e v sono legate ai potenziali di Schrödinger tramite $\varphi_\varepsilon = \varepsilon \log u$ e $\psi_\varepsilon = \varepsilon \log v$. Ciascuna iterazione è una proiezione I-divergenziale (nel senso di Csiszár) sul vincolo di marginalità corrispondente: il passo (7.7) proietta sulla marginalità su ν, il passo (7.8) sulla marginalità su μ. L'algoritmo è dunque una proiezione alternata nella geometria della divergenza di Kullback–Leibler, analoga al metodo di Dykstra per le proiezioni euclidee su insiemi convessi.

In pratica computazionale, l'algoritmo di Sinkhorn soffre di instabilità numerica per valori piccoli di ε: le quantità $\exp(-c(x,y)/\varepsilon)$ possono essere numericamente nulle per valori grandi di $c(x,y)/\varepsilon$. La stabilizzazione si ottiene lavorando in spazio logaritmico. Si definiscono $\alpha(x) = \varepsilon \log u(x)$ e $\beta(y) = \varepsilon \log v(y)$ (i potenziali logaritmici), e si riscrivo le iterazioni come

$$\beta^{(k)}(y) := -\varepsilon \log \int_X \exp((\alpha^{(k)}(x) - c(x,y))/\varepsilon)\, d\mu(x)$$

$$\alpha^{(k+1)}(x) := -\varepsilon \log \int_Y \exp((\beta^{(k)}(y) - c(x,y))/\varepsilon)\, d\nu(y).$$

Queste iterazioni sono numericamente stabili perché le operazioni di log-sum-exp possono essere implementate sottraendo il massimo (trucco standard di stabilizzazione numerica: $\log\sum_i \exp(a_i) = \max_j a_j + \log\sum_i \exp(a_i - \max_j a_j)$), e i potenziali α, β rimangono di ordine $O(1)$ indipendentemente da ε.

Teorema 7.2 (Convergenza lineare dell'algoritmo di Sinkhorn).

In contesto discreto (μ e ν misure finitely supported con N atomi), l'algoritmo di Sinkhorn (7.7)–(7.8) converge al piano ottimale γ_ε con tasso di convergenza geometrico: esistono costanti C > 0 e $\eta \in (0, 1)$ tali che $\|u^{(k)} \otimes v^{(k)} \cdot K - \gamma_\varepsilon\|_{TV} \leq C \cdot \eta^k$. Il tasso $\eta \leq 1 - \exp(-2/\varepsilon)(\min K / \max K)^2$ peggiora quando $\varepsilon \to 0$.

Dimostrazione. La dimostrazione utilizza la contrazione della metrica di Hilbert sul cono delle funzioni positive. La metrica di Hilbert tra due funzioni positive $f, g : [N] \to \mathbb{R}_{>0}$ è $\delta_H(f, g) := \log(\max_i f(i)/g(i)) - \log(\min_i f(i)/g(i))$. L'operatore $T : u \mapsto u'$ definito da un'iterazione di Sinkhorn è una mappa lineare positiva (endomorfismo del cono), e si dimostra che $\delta_H(Tu_1, Tu_2) \leq \eta\, \delta_H(u_1, u_2)$ con $\eta = \tanh((1/4)\delta_H(K_1, K_2)) < 1$, dove K_1 e K_2 sono la prima e la seconda riga della matrice K. La contrazione di Hilbert implica la convergenza geometrica al punto fisso unico (i.e., la coppia (u^*, v^*) corrispondente alla soluzione ottimale) per il teorema di Birkhoff. Il tasso di contrazione dipende dal rapporto $\min K / \max K$, che per $K = \exp(-c/\varepsilon)$ con c limitata è $\exp(-(\max c - \min c)/\varepsilon)$ e tende a zero esponenzialmente per $\varepsilon \to 0$. □

7.4 La Divergenza di Sinkhorn e la Correzione del Bias Entropico

Una difficoltà dell'uso di OT_ε come sostituto di W_2 nelle applicazioni è il cosiddetto bias entropico: per ε > 0, si ha $OT_\varepsilon(\mu, \mu)$ > 0 per ogni μ non puntuale, dunque OT_ε non è una distanza nel senso stretto. Più precisamente, il valore $OT_\varepsilon(\mu, \mu) = -\varepsilon H(\mu) \geq 0$ (dove H è l'entropia) non è nullo quando μ non è una massa di Dirac. Questo bias distorce le stime di distanza e può creare problemi nell'addestramento di reti neurali che usano OT_ε come funzionale di perdita.

Per correggere questo difetto, Genevay e collaboratori hanno introdotto la divergenza di Sinkhorn:

$$S_\varepsilon(\mu, \nu) := OT_\varepsilon(\mu, \nu) - (OT_\varepsilon(\mu, \mu) + OT_\varepsilon(\nu, \nu)) / 2.$$

La divergenza S_ε è simmetrica, non negativa e soddisfa $S_\varepsilon(\mu, \mu) = 0$ per costruzione. Essa interpola tra W_2^2 (per $\varepsilon \to 0$, dove la correzione del bias diventa trascurabile rispetto al termine principale) e la Maximum Mean Discrepancy (per $\varepsilon \to \infty$, dove OT_ε converge a una forma quadratica dipendente dal nucleo $k(x,y) = -c(x,y)$). La differenziabilità di S_ε rispetto ai parametri delle distribuzioni — garantita dalla differenziabilità dei potenziali ottimali rispetto ai dati — la rende adatta all'ottimizzazione tramite discesa del gradiente in ambito di apprendimento automatico.

Capitolo 8 — Applicazioni all'Intelligenza Artificiale e ai Modelli Generativi

8.1 Wasserstein GAN e la Dualità di Kantorovich–Rubinstein

I Generative Adversarial Networks (GAN) di Goodfellow et al. (2014) addestrano un generatore G_θ e un discriminatore D_ω in un gioco minimax. La funzione obiettivo originale è la divergenza di Jensen–Shannon:

$$\min_\theta \max_{D : \mathbb{R}^n \to [0,1]} \{ \mathbb{E}_{x\sim p_r}[\log D(x)] + \mathbb{E}_{z\sim p_z}[\log(1 - D(G_\theta(z)))] \}.$$

Un difetto ben noto di questo obiettivo è la saturazione dei gradienti: quando i supporti di p_r e $p_\theta = (G_\theta)_{\#} p_z$ sono disgiunti (situazione generica per distribuzioni concentrate su varietà di bassa dimensione in $\mathbb{R}^n$), la divergenza di Jensen–Shannon vale identicamente $\log 2$ e il suo gradiente rispetto a θ è nullo. Il generatore non riceve segnale di addestramento. Arjovsky, Chintala e Bottou (2017) proposero di sostituire la divergenza di Jensen–Shannon con la distanza W_1, ottenendo il Wasserstein GAN:

$$\min_\theta W_1(p_r, p_\theta) = \min_\theta \sup_{\|f\|_L \le 1} \{ \mathbb{E}_{x\sim p_r}[f(x)] - \mathbb{E}_{x\sim p_\theta}[f(x)] \}.$$

La distanza W_1 è definita e continua anche quando p_r e p_θ hanno supporti disgiunti, e il suo gradiente rispetto ai parametri θ del generatore è:

$$\nabla_\theta W_1(p_r, p_\theta) = -\mathbb{E}_{z\sim p_z}[\nabla_\theta f^*(G_\theta(z))],$$

che è ben definito e non satura. Il vincolo di Lipschitz sul discriminatore si impone nella pratica tramite clip dei pesi (Arjovsky et al.), penalizzazione del gradiente (Gulrajani et al., NIPS 2017: si aggiunge alla perdita il termine $\lambda\, \mathbb{E}_{\hat{x}}[(|\nabla_x D(\hat{x})| - 1)^2]$ con $\hat{x}$ sui segmenti tra campioni reali e generati), o normalizzazione spettrale (Miyato et al., ICLR 2018: si normalizza ogni strato della rete per la sua norma spettrale, garantendo $\mathrm{Lip}(D_\omega) \leq 1$).

8.2 Lo Schema JKO e i Flussi Gradiente in Spazio di Wasserstein

Nel 1998 Jordan, Kinderlehrer e Otto dimostrarono che l'equazione di Fokker–Planck

$$\partial_t \rho = \Delta\rho + \nabla \cdot (\rho \nabla V)$$

può essere interpretata come il flusso gradiente nello spazio di Wasserstein W_2 del funzionale di energia libera di Helmholtz:

$$\mathcal{F}(\rho) := \int \rho(x) \log \rho(x)\, dx + \int V(x)\, \rho(x)\, dx.$$

Il calcolo di Otto (Sezione 5.4) mostra che il gradiente di Wasserstein di $\mathcal{F}$ è $\mathrm{grad}_W \mathcal{F}(\rho) = -\nabla(\log \rho + V) = \nabla \log(e^{-V}/\rho)$, e l'equazione del flusso gradiente $\partial_t\rho = -\mathrm{grad}_W \mathcal{F}(\rho)$ si legge, tramite l'equazione di continuità con velocità $-\nabla(\log\rho + V)$, come $\partial_t\rho = \nabla\cdot(\rho\nabla(\log\rho + V)) = \Delta\rho + \nabla\cdot(\rho\nabla V)$, confermando la corrispondenza.

Lo schema JKO (Jordan–Kinderlehrer–Otto) discretizza nel tempo il flusso gradiente: dato $\rho^0 \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ e un passo temporale τ > 0, si definisce per induzione

$$\rho^{k+1} := \mathrm{argmin}_{\rho \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)} \{ W_2^2(\rho, \rho^k) / (2\tau) + \mathcal{F}(\rho) \}.$$

Ciascun passo dello schema JKO è un problema di minimizzazione che bilancia la vicinanza al passo precedente (misurata da W_2^2/(2τ)) con la diminuzione del funzionale $\mathcal{F}$. Questo è lo schema implicito (backward Euler) della teoria delle equazioni di evoluzione, adattato alla geometria dello spazio di Wasserstein. Jordan–Kinderlehrer–Otto dimostrarono che, per ogni T > 0, la successione di misure ottenuta interpolando i passi ρ^k con la geodetica di McCann converge, quando τ → 0, alla soluzione ρ(t) dell'equazione di Fokker–Planck con dato iniziale ρ^0. La convergenza richiede stime di stabilità per lo schema JKO (simili alle stime di Euler implicito per equazioni paraboliche), che si ottengono dalla convessità displacement del funzionale $\mathcal{F}$, analizzata nel Capitolo 9.

8.3 Modelli di Diffusione come Trasporto in Spazio di Wasserstein

I modelli di diffusione probabilistici (DDPM, Song–Ermon, Score-Based Generative Models) sono attualmente tra i più potenti modelli generativi per immagini e audio. La loro connessione con il trasporto ottimale è profonda. Il processo di forward diffusion aggiunge progressivamente rumore gaussiano a un campione x_0 ~ p_{data} tramite la SDE di Ornstein–Uhlenbeck:

$$dx_t = -(1/2)\, x_t\, dt + dW_t, \quad x_0 \sim p_\{data\},$$

la cui densità marginale p_t soddisfa l'equazione di Fokker–Planck ∂_t p_t = (1/2)(Δp_t + ∇·(p_t x)), che è il flusso gradiente in W_2 del funzionale KL(·|N(0, I_n)). Lo score ∇ log p_t, il cui apprendimento tramite score matching è il cuore del modello, è il gradiente di Wasserstein di questo funzionale. Il processo inverso (denoising) è descritto dalla SDE temporalmente invertita:

$$dx_t = [(1/2)\, x_t + \nabla_x \log p_t(x_t)]\, dt + \bar{d}W_t,$$

che trasporta p_T ≈ N(0, I_n) verso p_0 = p_{data} attraverso flussi di Fokker–Planck inversi. Apprendere lo score ∇ log p_t tramite score matching e

poi simulare la SDE inversa è il principio operativo dei DDPM. La prospettiva del trasporto ottimale suggerisce varianti in cui il trasporto da p_T a p_{data} è reso più diretto, usando il cammino geodetico di McCann come curva di riferimento: questo è il principio dei metodi di Rectified Flow (Liu et al., 2022) e Flow Matching (Lipman et al., 2022).

Capitolo 9 — Convessità di Displacement e Funzionali di Energia Libera

La convessità di displacement introdotta da McCann nel 1997, è la nozione di convessità naturale per i funzionali definiti su $\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$ munito della struttura geodetica di Wasserstein. Essa rimpiazza la convessità classica lungo i segmenti lineari con la convessità lungo le geodetiche di McCann, e ha implicazioni profonde per la teoria della stabilità dei flussi gradiente, per le disuguaglianze funzionali (Brunn–Minkowski, Talagrand, logaritmiche di Sobolev) e per la quantificazione della velocità di convergenza all'equilibrio delle equazioni di diffusione.

9.1 Definizione e Classi di McCann

Sia $\mathscr{F} : \mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n) \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ un funzionale di interazione-diffusione della forma:

$$\mathscr{E}(\rho) := \int U(\rho(x))\, dx + \int V(x)\, \rho(x)\, dx + (1/2) \iint W(x - y)\, \rho(x)\, \rho(y)\, dx\, dy,$$

dove il primo termine è un potenziale interno con funzione di energia $U : [0,\infty) \to \mathbb{R}$, il secondo è un potenziale esterno con potenziale V, e il terzo è un funzionale di interazione con nucleo simmetrico W. Si dice che $\mathscr{E}$ è displacement convesso se per ogni $\varrho_0, \varrho_1 \in \mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$ e ogni $t \in [0,1]$ si ha $\mathscr{E}(\varrho_t) \leq (1-t)\mathscr{E}(\varrho_0) + t\mathscr{E}(\varrho_1)$, dove ϱ_t è la geodetica di McCann tra ϱ_0 e ϱ_1.

Teorema 9.1 (Caratterizzazione di McCann, 1997).

Il funzionale $\mathscr{E}$ è displacement convesso se e soltanto se valgono le tre condizioni seguenti:

(i) La funzione $s \mapsto s^n U(s^{-n})$ è convessa e non crescente su $(0, \infty)$ (condizione di McCann sul termine di diffusione).

(ii) La funzione $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ è convessa.

(iii) Il nucleo di interazione $W : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ è convesso e simmetrico.

Dimostrazione. Abbozziamo la dimostrazione della condizione (i), che è la più interessante. Si calcola la derivata seconda di $t \mapsto \mathcal{E}^{int}(\rho_t) = \int U(\rho_t(x))\, dx$ lungo la geodetica di McCann. Usando la formula (iii) del Teorema 5.2 per la densità f_t e la derivazione per composizione, si ottiene che $\partial^2/\partial t^2 \int U(f_t)\, dx \geq 0$ se e soltanto se la funzione $p(s) := sU'(s) - U(s)$ (il pressione associata a U) è tale che $s \mapsto s^n U(s^{-n})$ sia convessa. Il calcolo esplicito per la scelta $U(s) = s \log s$ (entropia di Boltzmann) dà la convessità senza restrizioni (si verifica che $s \mapsto s^n(s^{-n} \log s^{-n}) = -n \log s$ è convexa per $n \geq 1$). Per la scelta $U(s) = s^m/(m-1)$ (entropia di Rényi con m > 1), la condizione diventa $m \geq 1 - 1/n$. □

9.2 La Disuguaglianza di Talagrand e la Catena HWI

Una delle applicazioni più eleganti della convessità di displacement è la derivazione della disuguaglianza di Talagrand tramite un argomento puramente geometrico in spazio di Wasserstein. La disuguaglianza di Talagrand correla la distanza W_2 con l'entropia relativa, e è un caso particolare della catena di disuguaglianze HWI (H per entropia, W per Wasserstein, I per informazione di Fisher).

Teorema 9.2 (Disuguaglianza di Talagrand — Otto–Villani, 2000).

Sia $\rho^* = e^{-V}/Z \in \mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$ una misura di Gibbs con potenziale V uniformemente convesso: $\nabla^2 V \geq \kappa I_n$ per qualche $\kappa > 0$. Allora per ogni $\mu \in \mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$:

$$W_2^2(\mu, \rho^*) \leq (2/\kappa) \cdot KL(\mu \mid \rho^*).$$

Dimostrazione. Si considera la geodetica di McCann μ_t da μ a ρ^*. Per la convessità displacement di $F = KL(\cdot|\rho^*)$ (che è garantita dalla convessità uniforme di V con costante κ), si ha la stima di Hessiano:

$d^2/dt^2\ KL(\mu_t \mid \rho^*) \geq \kappa \int |v_t|^2\, d\mu_t = \kappa\, W_2^2(\mu_0, \mu_1) = \kappa\, W_2^2(\mu, \rho^*)$,

dove il primo passaggio usa la κ-convessità displacement di KL e il secondo usa la struttura a velocità costante della geodetica ($|v_t| = W_2(\mu, \rho^*)$ costante in t). Integrando due volte tra 0 e 1 e usando le condizioni al bordo $KL(\mu_0|\rho^*) = KL(\mu|\rho^*)$ e $KL(\mu_1|\rho^*) = KL(\rho^*|\rho^*) = 0$:

$KL(\mu|\rho^*) = KL(\mu_0|\rho^*) \geq (1/2)\, \kappa\, W_2^2(\mu, \rho^*) \cdot \int_0^1 t(1-t) \cdot \ldots \geq (\kappa/2)\, W_2^2(\mu, \rho^*)$.

Riorganizzando si ottiene la disuguaglianza di Talagrand. □

La disuguaglianza di Talagrand fa parte di una gerarchia di disuguaglianze funzionali. La disuguaglianza logaritmica di Sobolev (LSI) afferma che sotto le stesse ipotesi

$$KL(\mu \mid \rho^*) \leq (1/2\kappa) \int |\nabla \log(d\mu/d\rho^*)|^2\, d\mu = (1/2\kappa)\, I(\mu \mid \rho^*),$$

dove $I(\mu|\rho^*) = \int |\nabla \log(d\mu/d\rho^*)|^2\, d\mu$ è l'informazione di Fisher relativa. La catena di disuguaglianze HWI di Bobkov–Gentil–Ledoux collega le tre quantità:

$$H(\mu|\rho^*) := KL(\mu|\rho^*) \leq W_2(\mu, \rho^*) \cdot I(\mu|\rho^*)^{1/2} - (\kappa/2)\, W_2^2(\mu, \rho^*).$$

La catena HWI implica sia LSI (prendendo il caso limite $\kappa \to 0$) sia la disuguaglianza di Talagrand (ottimizzando su I). Essa fornisce anche stime di concentrazione della misura ρ^* (tramite la disuguaglianza di Talagrand: la probabilità di deviare da un valore tipico decresce gaussianamente) e stime di convergenza per l'equazione di Fokker–Planck verso lo stato stazionario ρ^* (tramite la LSI: $H(\rho_t|\rho^*) \leq e^{-2\kappa t}\, H(\rho_0|\rho^*)$).

9.3 La Disuguaglianza di Brunn–Minkowski dalla Convessità di Displacement

Un ulteriore risultato classico che si presta a una dimostrazione elegante tramite la convessità displacement è la disuguaglianza di Brunn–Minkowski per la misura di Lebesgue:

Teorema 9.3 (Brunn–Minkowski).

Per ogni coppia di insiemi misurabili $A, B \subset \mathbb{R}^n$ non vuoti e ogni $t \in [0,1]$, si ha

$$L^n((1-t)A + tB)^{1/n} \geq (1-t)\, L^n(A)^{1/n} + t\, L^n(B)^{1/n}.$$

Dimostrazione. Siano $\mu = L^n(A)^{-1} \cdot L^n|_A$ e $\nu = L^n(B)^{-1} \cdot L^n|_B$ le misure uniformi su A e B rispettivamente. La misura interpolante μ_t di McCann è supportata su $(1-t)A + tB$ (perché $T_t = (1-t)id + t\, T^*$ mappa il supporto di μ in $(1-t)A + t\, B \subset (1-t)A + tB$). Dunque, applicando il funzionale di Rényi $U(s) = -s^{1-1/n}$ (che soddisfa la condizione di McCann con $m = 1 - 1/n$) e usando la convessità displacement:

$\int_{(1-t)A+tB} 1 \cdot dx \geq \exp(\int U(\rho_t(x))\, dx / (-1))$ (per Jensen e la monotonicità di U).

La convessità displacement del funzionale $-\int \rho^{1-1/n}\, dx$ dà $\int \rho_t^{1-1/n}\, dx \geq (1-t)\int \mu^{1-1/n} + t\int \nu^{1-1/n}$. Poiché μ è uniforme su A, $\int \mu^{1-1/n} = L^n(A)^{-1/n} \cdot L^n(A) = L^n(A)^{1-1/n}$, e analogamente per ν. Usando poi che la norma $L^{1-1/n}$ di μ_t è legata a $L^n((1-t)A+tB)$ tramite la disuguaglianza di Hölder inversa (disuguaglianza di Lyapunov), si ottiene la formula di Brunn–Minkowski.

Questo approccio, dovuto a McCann (1997), unifica la disuguaglianza di Brunn–Minkowski con la teoria dei flussi gradiente di Wasserstein. □

PARTE V

L'Equazione di Monge–Ampère: Teoria Ellittica e Connessioni con le PDE

Capitolo 10 — Struttura Ellittica dell'Equazione di Monge–Ampère

L'equazione di Monge–Ampère $\det \nabla^2\varphi = h$ è, tra le equazioni alle derivate parziali del secondo ordine pienamente nonlineari, quella con la struttura geometrica più ricca e la storia analitica più intricata. La sua non linearità non è di tipo semilineare — un'aggiunta nonlineare a un operatore lineare di fondo — bensì di tipo Bellman generalizzato: la funzione nonlineare $F(D^2u) = \det(D^2u)$ agisce sul valore dell'intera matrice hessiana simultaneamente, in modo invariante per rotazioni. Questa struttura fa dell'equazione di Monge–Ampère un membro paradigmatico della classe delle equazioni di tipo Monge–Ampère, le cui soluzioni convesse obbediscono a principi di comparazione, teorie della regolarità e comportamenti qualitativi fondamentalmente diversi da quelli delle equazioni ellittiche semilineari classiche come $-\Delta u = f$.

Il presente capitolo approfondisce la struttura analitica dell'equazione, discutendo in dettaglio la sua ellitticità e il confronto con la teoria classica di Schauder per operatori lineari del secondo ordine, la teoria delle soluzioni di viscosità nel senso di Crandall–Lions (che è più debole di quella di Aleksandrov ma si adatta meglio a equazioni non convesse), e il principio del massimo geometrico nella formulazione di Alexandrov–Bakel'man–Pucci.

10.1 L'Equazione come Operatore Monge–Ampère Generalizzato

La famiglia delle equazioni pienamente nonlineari del secondo ordine comprende, in linea di principio, qualsiasi equazione della forma $F(x, u, Du, D^2u)$

= 0 per un'opportuna funzione F. Il teorema di ellitticità di Hopf, nella sua forma generale, afferma che un'equazione del secondo ordine è ellittica in un punto u_0 se la matrice delle derivate parziali di F rispetto agli argomenti (D^2u) è definita positiva (o negativa) in quel punto. Per l'equazione di Monge–Ampère, la funzione F è F(M) = det(M) − h, e le derivate parziali ∂F/∂M_{ij} = C_{ij}(M), dove C_{ij}(M) è la matrice dei cofattori. Come osservato nel Capitolo 6, C(M) = det(M) · M^{−T} è definita positiva se e soltanto se M è definita positiva. L'equazione è dunque ellittica (nel senso del Teorema di Hopf) esattamente sulle soluzioni convesse con hessiana strettamente positiva.

Questa condizione di ellitticità non è uniforme: la costante di ellitticità, che nel caso dell'equazione di Monge–Ampère è data dal più piccolo autovalore della matrice dei cofattori $C(\nabla^2\varphi)$, può degenerare quando uno degli autovalori di $\nabla^2\varphi$ si avvicina a zero. Tale degenerazione è la principale fonte di difficoltà nella teoria della regolarità. Per l'equazione di Monge–Ampère, la degenerazione avviene lungo le direzioni in cui la funzione convessa φ è "piatta" (la funzione è lineare in qualche direzione), e il controllo di questa degenerazione è esattamente ciò che il Lemma delle Sezioni di Caffarelli garantisce sotto le ipotesi di limitatezza del dato h.

Un'importante classe di equazioni di tipo Monge–Ampère generalizzato si ottiene sostituendo $\det(\nabla^2\varphi)$ con una funzione simmetrica degli autovalori della hessiana. In questo contesto, le equazioni di Hessiano k-esimo $\sigma_k(\lambda_1, ..., \lambda_n) = h$, dove σ_k è l'elementare simmetrico k-esimo degli autovalori $\lambda_1 \leq ... \leq \lambda_n$ di $\nabla^2\varphi$, formano una gerarchia: σ_1 corrisponde al laplaciano Δφ (k=1, ellitticità uniforme), σ_n corrisponde al determinante della hessiana det $\nabla^2\varphi$ (k=n, ellitticità fortemente degenere), e i casi intermedi k=2,...,n−1 interpolano tra i due estremi. Le equazioni di Hessiano k-esimo, studiate da Trudinger, Urbas e Wang, sono ellittiche sulle soluzioni (k, n)-convesse (dove la k-esima funzione di curvatura è positiva) e ammettono teoremi di regolarità analoghi a quelli di Caffarelli, sebbene con tecniche parzialmente diverse.

10.2 Il Principio del Massimo di Aleksandrov–Bakel'man–Pucci

La teoria della regolarità per equazioni pienamente non lineari ellittiche si fonda su una versione non lineare del principio del massimo, nota come stima di Aleksandrov–Bakel'man–Pucci (ABP), che fornisce un controllo del massimo di u in termini della sua norma L^n sul dominio. Questa stima, in contrasto con il classico principio del massimo per operatori lineari (che dà controllo tramite il massimo dei dati al bordo), introduce una misura di "curvatura concentrata" che è la misura di Monge–Ampère μ[u].

Teorema 10.1 (Stima di Aleksandrov–Bakel'man–Pucci).

Sia $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un dominio limitato, e sia $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ una funzione con $u|_{\partial\Omega} \leq 0$ che soddisfi $F(D^2u) \geq f$ su Ω, dove F è un operatore pienamente nonlineare uniformemente ellittico con costanti $0 < \lambda \leq \Lambda$. Allora

$$\sup_\Omega u \leq C(n, \lambda, \Lambda, \mathrm{diam}(\Omega)) \cdot \|f^-\|_{L^n(\Omega)},$$

dove $f^- = \max(-f, 0)$ è la parte negativa di f. La costante C dipende solo da n, λ, Λ e dal diametro di Ω.

Dimostrazione. L'idea chiave è la costruzione dell'"insieme di contatto" $\Gamma^- := \{x \in \Omega : u(x) + p\cdot x \leq u(y) + p\cdot y$ per ogni $y \in \Omega$, per qualche $p \in \mathbb{R}^n$ con $|p| \leq \sup u / \mathrm{dist}(x, \partial\Omega)\}$, che è l'insieme dei punti dove u tocca il "cono" da sotto. Per ogni punto x_0 nel massimante, esiste un vettore p con |p| piccolo tale che $u(x_0) - u(x) \leq p\cdot(x_0 - x)$ per ogni x vicino, il che implica che $\nabla u(x_0) = p$ e $\nabla^2 u(x_0) \leq 0$. Poiché F è uniformemente ellittico, $F(D^2u) \geq f$ > 0 in Γ^- implica $\det(D^2u) \leq \det((\Lambda/\lambda)\cdot|p|\cdot I) =$

$(\Lambda/\lambda)^n \cdot |p|^n$ su Γ^-. Applicando il cambio di variabili: la palla B(0, sup u / diam) è contenuta nell'immagine $\nabla u(\Gamma^-)$ (ogni vettore p piccolo è raggiunto come gradiente in Γ^-), dunque per cambio di variabili $|B(0, \sup u / \mathrm{diam})| \leq \int_{\Gamma^-} \det(D^2u)\, dx \leq (\Lambda/\lambda)^n \int_{\Gamma^-} |f^-|^n \cdot |p|^n\, dx$. La stima ABP segue da questa catena di disuguaglianze dopo normalizzazione. □

La stima ABP è il punto di partenza per la teoria di Krylov–Safonov per operatori pienamente nonlineari: da essa si deducono, tramite un'analisi a cubetti di Calderón–Zygmund adattata al caso nonlineare, la stima di Harnack e la continuità hölderiana delle soluzioni (teorema di Krylov–Safonov, 1979–1983). Per l'equazione di Monge–Ampère con dato h limitato e uniformemente positivo, la stima ABP si combina con il Lemma delle Sezioni per produrre il teorema $C^{1,\alpha}$ di Caffarelli.

10.3 Viscosità, Aleksandrov e Comparazione tra le Nozioni di Soluzione

Per l'equazione di Monge–Ampère esistono tre nozioni principali di soluzione debole, ciascuna con i propri vantaggi e limitazioni: le soluzioni classiche C^2 (troppo restrittive per i problemi geometrici), le soluzioni di Aleksandrov (basate sulla misura di Monge–Ampère, ideali per la teoria della regolarità), e le soluzioni di viscosità nel senso di Crandall–Lions (definite tramite confronto con sopra/sottosoluzioni regolari, adatte all'analisi qualitativa). Queste tre nozioni coincidono per soluzioni convesse sotto ipotesi ragionevoli, ma differiscono su funzioni non convesse o in domini non regolari.

Una soluzione di viscosità convessa dell'equazione det $\nabla^2\varphi = h$ su $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ è una funzione convessa $\varphi : \Omega \to \mathbb{R}$ tale che: (i) per ogni $x_0 \in \Omega$ e ogni $\psi \in C^2(\Omega)$ con $\psi(x_0) = \varphi(x_0)$ e $\psi \geq \varphi$ in un intorno di x_0 (ψ è una sovra-tangente), si ha det $\nabla^2\psi(x_0) \leq h(x_0)$; (ii) per ogni $x_0 \in \Omega$ e ogni $\psi \in C^2(\Omega)$ con $\psi(x_0) = \varphi(x_0)$ e $\psi \leq \varphi$ in un intorno di x_0 (ψ è una sotto-tangente), si ha det $\nabla^2\psi(x_0) \geq h(x_0)$. Per funzioni convesse, questa definizione coincide con quella di Aleksandrov: una funzione convessa φ è soluzione di viscosità se e soltanto se la sua misura di Monge–Ampère $\mu[\varphi] = h \cdot L^n$.

Proposizione 10.1 (Equivalenza delle nozioni di soluzione per funzioni convesse).

Sia $\varphi : \Omega \to \mathbb{R}$ una funzione convessa localmente uniformemente convessa (cioè con $\nabla^2\varphi \geq cI$ q.o. per qualche c > 0 su ogni compatto di Ω) e $h \in C(\Omega)$ strettamente positiva. Allora le seguenti condizioni sono equivalenti: (i) φ è soluzione classica di det $\nabla^2\varphi = h$; (ii) φ è soluzione di Aleksandrov di det $\nabla^2\varphi = h$; (iii) φ è soluzione di viscosità convessa di det $\nabla^2\varphi = h$.

Dimostrazione. (i) $\Rightarrow$ (ii): immediata per la formula di cambio di variabili. (ii) $\Rightarrow$ (iii): sia $\psi \in C^2$ una sovra-tangente in x_0. Allora $\partial\varphi(B(x_0, r)) \subset \partial\psi(B(x_0, r))$ per r piccolo (perché $\psi \geq \varphi$ con $\psi(x_0) = \varphi(x_0)$ implica che ogni sottodiferenziale di φ in un intorno di x_0 è anche sottodiferenziale di ψ tramite un confronto afffine). Dunque $\mu[\varphi](B(x_0, r)) \leq \mu[\psi](B(x_0, r)) = \int_{B(x_0,r)} \det \nabla^2\psi \, dx$. Dividendo per $|B(x_0,r)|$ e mandando $r \to 0$, si ottiene $h(x_0) = (d\mu[\varphi]/dL^n)(x_0) \leq \det \nabla^2\psi(x_0)$, il che è esattamente la condizione di viscosità. (iii) $\Rightarrow$ (ii) richiede un argomento di approssimazione tramite supraconvoluzioni di Moreau, che mostra che la condizione di viscosità implica la diseguaglianza $\mu[\varphi] \leq h \cdot L^n$ in senso misura (e $\mu[\varphi] \geq h \cdot L^n$ dalla condizione duale), dunque

l'uguaglianza. (ii) $\Longrightarrow$ (i) è la regolarità di Caffarelli (Teoremi 6.1 e 6.2). □

10.4 Connessioni con le PDE Ellittiche: la Teoria Linearizzata

La linearizzazione dell'equazione di Monge–Ampère attorno a una soluzione liscia φ_0 è un operatore ellittico lineare del secondo ordine con coefficienti dati dai cofattori della hessiana. Questa osservazione apre un collegamento diretto tra la teoria di Caffarelli per l'equazione non lineare e la teoria classica di Schauder per operatori ellittici lineari, e spiega a livello qualitativo perché i risultati di regolarità per le due teorie sono paralleli.

Più precisamente, se $\varphi_\varepsilon = \varphi_0 + \varepsilon v + O(\varepsilon^2)$ è una variazione di φ_0, allora $\det \nabla^2\varphi_\varepsilon = \det \nabla^2\varphi_0 \cdot (1 + \varepsilon \cdot \mathrm{tr}((\nabla^2\varphi_0)^{-1} \nabla^2 v) + O(\varepsilon^2))$. L'operatore linearizzato è dunque $L_{\varphi_0} v := \mathrm{tr}(A_0 \nabla^2 v)$ dove $A_0 = \det(\nabla^2\varphi_0) \cdot (\nabla^2\varphi_0)^{-1}$ è la matrice dei cofattori (simmetrica, definita positiva su soluzioni convesse strette). Questo è un operatore ellittico lineare del tipo $-\sum_{ij} a_{ij} \partial^2_{ij}$ con coefficienti $a_{ij} = \det(\nabla^2\varphi_0) \cdot (\nabla^2\varphi_0)^{-1}_{ij}$. Se $\varphi_0 \in C^{2,\alpha}$, i coefficienti a_{ij} sono in C^α, e la teoria classica di Schauder per operatori ellittici lineari (teorema di Agmon–Douglis–Nirenberg) garantisce che le soluzioni di $L_{\varphi_0} v = f$ con $f \in C^\alpha$ appartengono a $C^{2,\alpha}$. Tramite argomenti di punto fisso nel metodo della continuazione di Campanato, questo collegamento permette di bootstrappare la regolarità dell'equazione nonlineare: $\varphi_0 \in C^{2,\alpha}$ implica $A_0 \in C^\alpha$, che implica le soluzioni dell'equazione lineare in $C^{2,\alpha}$, che a loro volta, per continuazione, danno $\varphi \in C^{2,\alpha}$.

Teorema 10.2 (Bootstrap di regolarità tramite linearizzazione).

Sia $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un dominio convesso limitato con bordo $C^{k+2,\alpha}$ per qualche $k \geq 0$, $\alpha \in (0,1)$. Siano $f, g \in C^{k,\alpha}(\Omega)$ con $0 < \lambda \leq$

$f, g \le \Lambda$. Se $\varphi \in C^{2,\beta}(\Omega)$ per qualche $\beta \in (0,1)$ è una soluzione convessa di $\det \nabla^2\varphi = f/g(\nabla\varphi)$ su Ω con $\nabla\varphi(\Omega) \supset\supset spt(g)$, allora $\varphi \in C^{k+2,\alpha}(\Omega)$ e si ha la stima a priori

$$\|\varphi\|_{C^{k+2,\alpha}(\Omega)} \le C(n, k, \alpha, \lambda, \Lambda, \Omega) \cdot (\|f\|_{C^{k,\alpha}} + \|g\|_{C^{k,\alpha}} + \|\varphi\|_{C^{2,\beta}}).$$

In particolare, per $f, g \in C^\infty(\Omega)$ e Ω con bordo C^∞, la mappa di Brenier $T = \nabla\varphi$ è un C^∞-diffeomorfismo da $spt(f)$ a $spt(g)$.

Dimostrazione (schema). Si procede per induzione su k. Il caso k = 0 è il Teorema 6.2 di Caffarelli. Per il passo induttivo: sia $\varphi \in C^{k+2,\alpha}$ per ipotesi induttiva. Si differenzia l'equazione $\det \nabla^2\varphi = h(x, \nabla\varphi)$ rispetto a x_l per ogni l: l'equazione differenziata è $\mathrm{tr}(C(\nabla^2\varphi) \cdot \nabla^2(\partial_{x_l} \varphi)) = \partial_{x_l} h + \sum_i (\partial_{p_i} h)(\nabla\varphi) \cdot \partial^2_{x_l x_i} \varphi$, dove $C(\nabla^2\varphi)$ è la matrice dei cofattori. Questo è un sistema lineare ellittico per le derivate $\partial_{x_l}\varphi$ con coefficienti in $C^{k,\alpha}$ (per ipotesi induttiva su φ) e dato al secondo membro in $C^{k,\alpha}$ (per le ipotesi su h). La teoria di Schauder per operatori ellittici lineari con coefficienti $C^{k,\alpha}$ garantisce $\partial_{x_l}\varphi \in C^{k+1,\alpha}$, dunque $\varphi \in C^{k+2,\alpha}$. □

10.5 L'Equazione di Monge–Ampère Complessa e Applicazioni Geometriche

Nel contesto della geometria kähleriana, l'equazione di Monge–Ampère compare in forma complessa: $\det(\partial^2\varphi / \partial z_i \partial \bar{z}_j) = h$, dove il determinante è ora il determinante di una matrice hermitiana $n \times n$ (il determinante complesso di Monge–Ampère). Questa equazione, nota come equazione di Calabi–Yau, fu proposta da Calabi nel 1954 come condizione per l'esistenza di metriche kähleriane con curvatura di Ricci prescritta, e dimostrata da Yau nel 1978 in una delle dimostrazioni più tecnicamente elaborate e influenti della matematica del ventesimo secolo. La strategia di Yau è una continuazione di tipo Schauder

(metodo del continuazione) che riduce l'equazione non lineare a una sequenza di problemi lineari, sfruttando stime a priori di tipo $C^{1,\alpha}$ e $C^{2,\alpha}$ analoghe a quelle di Caffarelli nel caso reale. Il teorema di Yau garantisce che su ogni varietà kähleriana compatta senza bordo con classe di Chern $c_1 = 0$ (varietà di Calabi–Yau) esiste una metrica kähleriana con curvatura di Ricci identicamente nulla: questa è la base geometrica per la costruzione degli spazi interni nella teoria delle stringhe.

Capitolo 11 — Teoria di Caffarelli: Stime Quantitative e Regolarità Globale

Il capitolo precedente ha posizionato l'equazione di Monge–Ampère nella teoria generale delle PDE ellittiche pienamente nonlineari. Il presente capitolo approfondisce i dettagli tecnici della teoria di Caffarelli, sviluppando gli argomenti relativi alle sezioni in modo quantitativo, estendendo i risultati alle stime globali (fino al bordo del dominio), e discutendo il regime di bassa regolarità in cui i dati sono soltanto misurabili e il dato h soddisfa ipotesi di tipo Muckenhoupt piuttosto che di Hölder.

11.1 Il Lemma di John e la Normalizzazione delle Sezioni

Il punto di partenza della teoria di Caffarelli è un fatto puramente convesso-geometrico: ogni insieme convesso limitato è contenuto in un ellissoide di John, che è l'ellissoide di volume minimo che lo contiene. Il teorema di John del 1948 afferma che se E è un insieme convesso con $E \subset E_J$ (l'ellissoide di John) e z_E è il centro dell'ellissoide, allora $(1/n)(E_J - z_E) + z_E \subset E \subset E_J$. In altri termini, l'ellissoide di John e la sua immagine con fattore 1/n di contrazione (centrata nello stesso punto) incapsulano E dall'esterno e dall'interno rispettivamente, con una distorsione uniforme che dipende soltanto dalla dimensione n.

Teorema 11.1 (Lemma di John, 1948).

Sia $E \subset \mathbb{R}^n$ un insieme convesso, compatto, con interno non vuoto.

Esiste un unico ellissoide $E_J = \{x : (x - z)^T A^{-2} (x - z) \leq 1\}$ di

volume minimo contenente E, detto ellissoide di John di E. Se z_E *è il centro di massa di E, allora*

$$z_E + (1/n)(E_J - z_E) \subset E \subset E_J.$$

Dimostrazione. L'esistenza e unicità dell'ellissoide di John seguono dalla compattezza dell'insieme degli ellissoidi contenenti E (nella topologia indotta dalla convergenza delle radici quadrate delle matrici) e dalla strettamente convessa del funzionale volume. Per la disuguaglianza di inclusione interna, si dimostra che se $x_0 \in E_J \setminus (z_E + (1/n)(E_J - z_E))$, allora l'ellissoide perturbato che include E e x_0 ma esclude i punti di E lontani da x_0 avrebbe volume strettamente minore, contraddicendo la minimalità di E_J. La dimostrazione costruttiva usa il lemma di Fritz John sulle condizioni di ottimalità per la minimizzazione del determinante su corpi convessi. □

Nel contesto di Caffarelli, il Lemma di John è applicato alle sezioni $S_h(x_0)$ della funzione convessa φ. La normalizzazione consiste nel trovare una trasformazione lineare affine $T_{x_0,h} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ tale che $T_{x_0,h}(S_h(x_0))$ abbia ellissoide di John uguale alla palla unitaria: $T_{x_0,h} = A_{x_0,h}^{-1}(\cdot - z_{x_0,h})$ dove $A_{x_0,h}$ è la radice quadrata dell'ellissoide di John di $S_h(x_0)$ e $z_{x_0,h}$ è il suo centro. Dopo questa trasformazione, la funzione normalizzata $\varphi_{x_0,h}(y) = h^{-1}[\varphi(T_{x_0,h}^{-1}(y) + x_0) - \varphi(x_0) - \nabla\varphi(x_0) \cdot T_{x_0,h}^{-1}(y)]$ soddisfa $B(0,1) \subset S_1(0) \subset B(0,n)$ (per il Lemma di John) e l'equazione di Monge–Ampère con dato $\tilde{h}(y) := \det(A_{x_0,h}^{-1}) \cdot h(T_{x_0,h}^{-1}(y)) / h$ soddisfacente $0 < \lambda/n^{n/2} \leq \tilde{h} \leq \Lambda \cdot n^{n/2}$. La normalizzazione riduce dunque il problema generale a un problema con sezioni vicine alla palla unitaria.

11.2 Il Teorema di Localizzazione di Caffarelli

Il teorema di localizzazione è il cuore geometrico della teoria di Caffarelli. Esso afferma che, sotto le ipotesi del Teorema 6.1, le sezioni di φ si comportano quasi come sezioni di funzioni quadratiche (per le quali $S_h(x_0)$ è un ellissoide): l'eccentricità (il rapporto tra l'asse maggiore e l'asse minore dell'ellissoide di John) rimane uniformemente controllata.

Teorema 11.2 (Localizzazione di Caffarelli, 1990).

Siano $0 < \lambda \leq h \leq \Lambda < \infty$ su $\mathbb{R}^n$ con $spt(h \cdot L^n)$ convesso, e sia φ soluzione di Aleksandrov di $\det \nabla^2\varphi = h$ su $\mathbb{R}^n$ con φ convessa. Per ogni compatto $K \subset spt(\mu_0)$ esistono costanti c_1, c_2 > 0 dipendenti solo da n, λ, Λ e dalla distanza di K dal bordo di $spt(\mu_0)$ tali che, per ogni $x_0 \in K$ e h > 0 sufficientemente piccolo:

$$c_1 h^{1/2} B_E \subset S_h(x_0) - x_0 \subset c_2 h^{1/2} B_E$$

dove B_E è la palla di John normalizzata (dipendente da x_0 ma con eccentricità uniformemente controllata: gli assi dell'ellissoide di John di $S_h(x_0) - x_0$ soddisfano $a_max/a_min \leq C(n,\lambda,\Lambda)$).

Dimostrazione (strategia). Si lavora con la funzione normalizzata $\tilde{\varphi}$ ottenuta dalla sezione $S_1(x_0)$ tramite il Lemma di John. Per $\tilde{\varphi}$, si deve dimostrare che $S_t(0) \approx t^{1/2} B$ per ogni $t \in [0,1]$. Il passo chiave è il seguente lemma di non-collasso: per ogni ε > 0, se $\tilde{\varphi}$ è normalizzata su $S_1(0)$ con $B(0,1/n) \subset S_1(0) \subset B(0,1)$ e $\det \nabla^2\tilde{\varphi} \in [\lambda,\Lambda]$, allora per ogni direzione $e \in S^{n-1}$, la larghezza della sezione $S_t(0)$ nella direzione e è almeno $c(n,\lambda,\Lambda)\cdot t^{1/2}$. Questo si dimostra per contradizione: se la larghezza fosse piccola (diciamo $\leq \delta\cdot t^{1/2}$), allora la sezione $S_t(0)$ sarebbe molto allungata nella direzione e e molto piatta nelle direzioni perpendicolari; ma questo contradirebbe la stima di misura $\mu[\tilde{\varphi}](S_t(0)) \geq \lambda \cdot L^n(S_t(0)) \geq \lambda \cdot c(n)\, t^{n/2}$, perché un ellissoide piatto di semiasse $\delta\cdot t^{1/2}$ ha volume dell'ordine $\delta \cdot$

$t^{n/2}$, che per δ piccolo è inferiore a $\lambda \cdot c(n) \cdot t^{n/2}$. Iterando l'argomento e usando la compattezza delle sezioni normalizzate, si conclude il teorema. □

11.3 Stime $C^{2,\alpha}$ via Schauder Nonlineare

Una volta stabilito il Teorema di Localizzazione, la stima $C^{1,\alpha}$ del Teorema 6.1 segue dal controllo della variazione del gradiente $\nabla\varphi$ in termini della variazione di x: se $S_h(x_0)$ e $S_h(x_1)$ si sovrappongono (cioè $x_1 \in S_h(x_0)$), allora $|\nabla\varphi(x_0) - \nabla\varphi(x_1)|/|x_0 - x_1|^\alpha \leq C$ per un certo α determinato geometricamente. Il passaggio dalla stima $C^{1,\alpha}$ alla stima $C^{2,\alpha}$ richiede un ulteriore argomento, di tipo Schauder nonlineare, che si basa sulla differenziazione dell'equazione di Monge–Ampère e sull'applicazione della teoria di Schauder all'operatore linearizzato.

Si definisce la funzione di eccesso di Caffarelli sulla sezione $S_h(x_0)$ come $E(x_0, h) := \sup_{x, y \in S_h(x_0)} |\nabla\varphi(x) - \nabla\varphi(y) - \nabla^2\varphi(x_0)(x - y)| / h^{\alpha/2}$, che misura la deviazione del gradiente dalla previsione lineare dell'approssimazione di secondo ordine. Il lemma di decadimento dell'eccesso afferma che $E(x_0, \theta h) \leq \theta^\beta E(x_0, h) + C(n,\lambda,\Lambda) \cdot \|h\|_{C^\alpha}^{1/2}$ per $\theta \in (0,1)$ e $\beta \in (0,1)$ opportuni. Iterando questo lemma con $h_k = \theta^k$, si ottiene la stima $E(x_0, h_k) \to 0$ geometricamente, il che implica la differenziabilità puntuale di $\nabla\varphi$ e la stima $C^{2,\alpha}$ per $\nabla^2\varphi$.

11.4 Regolarità Globale e Problemi al Bordo

I Teoremi 6.1 e 6.2, nella loro formulazione del Capitolo 6, riguardano la regolarità locale (interna al dominio). Estendere la regolarità fino al bordo di Ω richiede ipotesi aggiuntive sia sul bordo $\partial\Omega$ sia sul dato al bordo. Il risultato principale è dovuto a Caffarelli, Nirenberg e Spruck (1984) per il caso del dato al bordo di Dirichlet, e a Urbas (1988) per il caso del dato al bordo di Neumann (che compare naturalmente in problemi di trasporto con vincoli di riflessione).

Per il problema di Dirichlet: $\det \nabla^2\varphi = h$ su Ω, $\varphi = g$ su $\partial\Omega$, con Ω dominio convesso liscio, $0 < \lambda \leq h \leq \Lambda$ in $C^k(\Omega)$, $g \in C^{k+2,\alpha}(\partial\Omega)$, la soluzione convessa φ appartiene a $C^{k+2,\alpha}(\Omega)$ e soddisfa la stima

$$\|\varphi\|_{C^{k+2,\alpha}(\Omega)} \leq C \cdot (\|h\|_{C^{k,\alpha}(\Omega)} + \|g\|_{C^{k+2,\alpha}(\partial\Omega)} + 1).$$

La dimostrazione della regolarità al bordo richiede un'analisi delle sezioni di φ vicino a $\partial\Omega$, dove le sezioni sono "tagliate" dal bordo e non sono più insiemi convessi liberi. Caffarelli ha esteso il Teorema di Localizzazione alle sezioni parziali vicino al bordo, dimostrando che esse si comportano come semipalle (intersezione di una palla con un semispazio) piuttosto che come palle intere, il che preserva il controllo dell'eccentricità necessario per le stime di Hölder. Le condizioni al bordo di tipo obliquo (come i vincoli di riflessione che compaiono nel trasporto ottimale con ostacoli) richiedono tecniche diverse, basate sulla moltiplicazione per funzioni barriera che controllano il comportamento della soluzione vicino al bordo.

Un caso particolare di grande interesse è il problema di trasporto ottimale sulla sfera S^n, dove il trasporto è tra due misure di probabilità su S^n con la distanza geodetica come costo. In questo caso l'equazione di Monge–Ampère compare in forma sferica: $\det_S(\nabla_{S^2} \varphi + \varphi I) = h$, dove ∇_{S^2} denota l'hessiano intrinseco sulla sfera e $\det_S$ il suo determinante. La teoria di Caffarelli si estende a questo contesto per dati h lisci, e i risultati di regolarità sono stati stabiliti da Caffarelli, Gutierrez e Huang (2008) e da Loeper (2009). La condizione geometrica sull'equazione di Monge–Ampère sulla sfera è la condizione di Ma–Trudinger–Wang sul costo di trasporto, che generalizza in modo elegante la condizione di convessità del supporto di ν al caso di costi geometrici su varietà.

PARTE VI

Sinkhorn, Regolarizzazione Entropica e Applicazioni all'Intelligenza Artificiale

Capitolo 12 — Algoritmo di Sinkhorn: Teoria Avanzata, Varianti e Complessità

Il Capitolo 7 ha introdotto l'algoritmo di Sinkhorn come iterazione di proiezioni I-divergenziali per la risoluzione del problema di trasporto ottimale con regolarizzazione entropica OT_ε. In questo capitolo sviluppiamo la teoria in dimensione maggiore: dapprima estendiamo la convergenza al caso di misure continue (non più discrete), poi analizziamo la complessità campionaria — quante campioni da μ e ν sono necessari per approssimare OT_ε a precisione δ — quindi descriviamo le varianti algoritmiche più efficienti in pratica (epsilon-scaling, Sinkhorn stocastico, Sinkhorn online), e infine trattiamo il problema di trasporto ottimale non bilanciato, dove il vincolo di conservazione della massa viene rilassato.

12.1 Convergenza nel Caso Continuo: l'Algoritmo di Sinkhorn in Spazio Infinito-Dimensionale

Nel caso di misure continue $\mu \in \mathscr{P}(X)$ e $\nu \in \mathscr{P}(Y)$ su spazi polacchi, le iterazioni di Sinkhorn si riscrivono come operatori di integrazione contro il nucleo di Gibbs $K(x,y) = \exp(-c(x,y)/\varepsilon)$. Si definiscono gli operatori integrali lineari

$$(K\alpha)(y) := \int_X K(x,y)\, \alpha(x)\, d\mu(x), \qquad (K^T \beta)(x) := \int_Y K(x,y)\, \beta(y)\, d\nu(y),$$

entrambi a valori in $C(Y)$ e $C(X)$ rispettivamente quando K è continuo e μ, ν sono misure di Radon. Le iterazioni di Sinkhorn in forma esponenziale si scrivono come:

$$\beta^{(k+1)} = 1 / (K\alpha^{(k)}), \quad \alpha^{(k+1)} = 1 / (K^T \beta^{(k+1)}),$$

dove la divisione è puntuale. La convergenza di queste iterazioni in spazio continuo richiede un argomento diverso da quello del caso discreto (contrazione di Hilbert su matrici): si utilizza la teoria degli operatori integrali di Hilbert–Schmidt e una versione funzionale del teorema di Birkhoff per mappe contrattive in spazi metrici completi.

Teorema 12.1 (Convergenza di Sinkhorn in spazio continuo, Ruschendorf 1995).

Siano X, Y spazi polacchi compatti, $\mu \in \mathscr{P}(X)$, $\nu \in \mathscr{P}(Y)$, e $c : X \times Y \to \mathbb{R}$ continua. Per ogni ε > 0, l'algoritmo di Sinkhorn converge: $\alpha^{(k)} \to \alpha^*$ e $\beta^{(k)} \to \beta^*$ in $L^\infty(\mu) \times L^\infty(\nu)$ rispettivamente, dove (α^*, β^*) è la coppia unica (a meno di costante moltiplicativa) tale che il piano $\gamma_\varepsilon(dx, dy) = \alpha^*(x) K(x,y) \beta^*(y) d\mu(x)d\nu(y)$ appartiene a $\Pi(\mu,\nu)$. La convergenza è geometrica con tasso

$$\|\log \alpha^{(k)} - \log \alpha^*\|_{L^\infty(\mu)} \le \eta^k \cdot \|\log \alpha^{(0)} - \log \alpha^*\|_{L^\infty(\mu)},$$

dove $\eta = \tanh(\delta_H(K)/4) < 1$ e $\delta_H(K)$ è il diametro di Hilbert dell'operatore K (misura la variazione relativa del nucleo).

Dimostrazione (schema). Il nucleo $K(x,y)$ > 0 (strettamente positivo perché c è continua su compatti, dunque limitata) definisce un endomorfismo lineare del cono $C_+(X) := \{\alpha : X \to \mathbb{R}_{>0}\}$ equipaggiato con la metrica di Hilbert $\delta_H(\alpha_1, \alpha_2) = \log(\sup_x \alpha_1(x)/\alpha_2(x)) - \log(\inf_x \alpha_1(x)/\alpha_2(x))$. Il lemma di Birkhoff–Hopf (1957) afferma che ogni operatore lineare positivo $T : C_+(X) \to C_+(Y)$ con nucleo K strettamente positivo è una contrazione nella metrica di Hilbert: $\delta_H(T\alpha_1, T\alpha_2) \le$

$\tanh(\delta_H(K)/4) \cdot \delta_H(\alpha_1, \alpha_2)$. Poiché ogni iterazione di Sinkhorn è la composizione di due operatori K e K^T, entrambi contrattivi nel senso di Hilbert, la convergenza geometrica segue per composizione. Il tasso $\eta \leq \tanh(\delta_H(K)/4)$ con $\delta_H(K) = \log(\max_{x,y,x',y'} K(x,y)K(x',y') / (K(x,y')K(x',y))) = (\max c - \min c)/\varepsilon$. □

12.2 Complessità Campionaria e Stima della Deviazione

Nella pratica statistica e nell'apprendimento automatico, μ e ν sono sconosciute e accessibili soltanto tramite campioni i.i.d. $X_1, \ldots, X_N \sim \mu$ e $Y_1, \ldots, Y_N \sim \nu$. Si approssimano $\mu \approx \mu_N = (1/N)\sum_i \delta_{X_i}$ e $\nu \approx \nu_N = (1/N)\sum_j \delta_{Y_j}$, e si stima $OT_\varepsilon(\mu,\nu) \approx OT_\varepsilon(\mu_N, \nu_N)$. La complessità campionaria è determinata dalla velocità con cui $OT_\varepsilon(\mu_N, \nu_N) \to OT_\varepsilon(\mu,\nu)$ in probabilità al crescere di N.

Teorema 12.2 (Complessità campionaria per OT_ε, Genevay–Chizat–Bach–Cuturi–Peyré 2019).

Siano $\mu, \nu \in \mathscr{P}(X)$ su spazio compatto $X \subset \mathbb{R}^d$ con diametro D, e sia $c(x,y) = \|x-y\|^2$. Per ogni ε > 0 e ogni δ > 0, se $N \geq C(d, \varepsilon, D) \cdot \delta^{-2}$ allora con probabilità almeno $1 - 2\exp(-N\delta^2/(2C))$ si ha

$$|OT_\varepsilon(\mu_N, \nu_N) - OT_\varepsilon(\mu, \nu)| \leq \delta.$$

In particolare, la costante dipende da ε come $C \sim \exp(D^2/\varepsilon)$, il che mostra che la stima è tanto più favorevole quanto più grande è ε (più regolarizzazione entropica). Per $\varepsilon = 0$ (trasporto ottimale esatto), le stime campionarie deteriorano esponenzialmente nella dimensione (curse of dimensionality).

Dimostrazione (schema). La funzione $\varepsilon \mapsto OT_\varepsilon(\mu, \nu)$ è differenziabile rispetto alla misura μ, con derivata duale data dai potenziali ottimali di Schrödinger. I potenziali φ_ε e ψ_ε sono Lipschitz con costante $\mathrm{Lip}(\varphi_\varepsilon), \mathrm{Lip}(\psi_\varepsilon) \leq D^2/\varepsilon$ (si deduce dalla formula $OT_\varepsilon = \int \varphi_\varepsilon \, d\mu + \int \psi_\varepsilon \, d\nu$ e dalla regolarità dei potenziali entropici). La deviazione $|OT_\varepsilon(\mu_N,\nu) - OT_\varepsilon(\mu,\nu)|$ è quindi controllata dalla deviazione $\int \varphi_\varepsilon \, d(\mu_N - \mu)$, che è un processo empirico su una classe di funzioni Lipschitz con costante D^2/ε. Applicando la disuguaglianza di Rademacher per processi empirici su classi Lipschitz, si ottiene la stima cercata con $C \sim (D^2/\varepsilon)^2$. La dipendenza esponenziale da $\varepsilon \mapsto 0$ per la distanza di Wasserstein esatta segue invece dalla dimensione VC delle classi di funzioni ottimali di Kantorovich. □

12.3 Epsilon-Scaling e Algoritmi Multilivello

Un difetto pratico dell'algoritmo di Sinkhorn a ε piccolo è la lentezza della convergenza: il tasso geometrico $\eta \to 1$ come $\varepsilon \to 0$ (poiché $\delta_H(K) \to \infty$), rendendo il numero di iterazioni necessarie per raggiungere precisione δ pari a $O(1/\varepsilon^2)$. La strategia di epsilon-scaling, proposta indipendentemente da Schmitzer (2019) e altri, abbatte questa complessità sfruttando la relazione tra soluzioni a ε diversi: si inizializza l'algoritmo di Sinkhorn per $\varepsilon_{finale} \ll 1$ con la soluzione calcolata per $\varepsilon_{iniziale} \gg 1$ come punto di partenza, iterando una sequenza decrescente ε_0 > ε_1 > ... > $\varepsilon_F = \varepsilon_{finale}$.

Più formalmente, si sceglie la sequenza geometrica $\varepsilon_k = \varepsilon_0 \cdot r^k$ per $r \in (0,1)$, si eseguono T_k iterazioni di Sinkhorn per ciascun livello ε_k, e si usa la soluzione $(u^{(k)}, v^{(k)})$ per ε_k come inizializzazione di Sinkhorn per ε_{k+1}. La chiave teorica è che i potenziali ottimali $\varphi_\varepsilon(x)$ sono continui in ε (per la differenziabilità di OT_ε) e la loro variazione è dell'ordine $\|\varphi_{\varepsilon_k} - \varphi_{\varepsilon_{k+1}}\| \sim |\varepsilon_k - \varepsilon_{k+1}| \cdot \|\partial_\varepsilon \varphi_\varepsilon\| \sim (1-r)\, \varepsilon_k \cdot H(\gamma_{\varepsilon_k} \mid \mu\otimes\nu) / \varepsilon_k$

~ (1−r) H(γ_{ε_k} | μ⊗ν), dove H è l'entropia relativa. La variazione dei potenziali a ciascun livello è piccola, e basta O(1) iterazioni di Sinkhorn per scendere da un livello al successivo. La complessità totale dell'epsilon-scaling è O(log(ε_0/ε_F) · N^2) rispetto a O(N^2 / ε_F^2) del Sinkhorn puro, un miglioramento drastico per ε_F ≪ 1.

12.4 Trasporto Ottimale Non Bilanciato

Il trasporto ottimale classico richiede la conservazione esatta della massa: le marginali di γ devono essere esattamente μ e ν. In molte applicazioni — bioinformatica (confronto di cellule con popolazioni diverse), computer vision (confronto di immagini con luminosità diverse), apprendimento automatico (robustezza agli outlier) — questo vincolo è troppo rigido. Il trasporto ottimale non bilanciato (Unbalanced Optimal Transport, UOT) rilassa il vincolo di marginalità tramite una penalizzazione della divergenza tra le marginali di γ e le misure target μ e ν.

Per una funzione di divergenza D (tipicamente la divergenza KL o una distanza di tipo Csiszár), il problema UOT è:

$$UOT_\varepsilon(\mu,\nu) := \min_\{\gamma \in \mathscr{P}(X\times Y)\} \{ \int c\, d\gamma + \varepsilon\, KL(\gamma \mid \mu\otimes\nu) + \tau\, KL(\pi_X\, \gamma \mid \mu) + \tau\, KL(\pi_Y\, \gamma \mid \nu) \},$$

dove τ > 0 è il parametro di penalizzazione (τ → ∞ recupera il trasporto bilanciato). La soluzione ottimale γ_{ε,τ} ha ancora la forma di Gibbs: dγ_{ε,τ} = u(x) K(x,y) v(y) dμ(x) dν(y), ma le condizioni di ottimalità per (u,v) sono ora equazioni di punto fisso soft anziché le equazioni di normalizzazione esatte di Sinkhorn. Il problema UOT con penalizzazione KL ammette l'algoritmo di Sinkhorn non bilanciato:

$$v^{(k+1)} = (K^T u^{(k)})^{-\varepsilon/(\varepsilon+\tau)}, \quad u^{(k+1)} = (K v^{(k+1)})^{-\varepsilon/(\varepsilon+\tau)},$$

che converge al piano ottimale $\gamma_{\varepsilon,\tau}$ con tasso geometrico $\eta_{UOT} = \tanh(\delta_H(K)/4)^{\varepsilon/(\varepsilon+\tau)}$, uniformemente controllato per ogni τ > 0 (a differenza del caso bilanciato $\tau = \infty$, dove la convergenza si degrada per $\varepsilon \to 0$). Il trasporto non bilanciato con penalizzazione KL è dunque algoritmicamente più stabile del trasporto bilanciato, il che lo rende particolarmente attraente per applicazioni con outlier o distribuzione di massa variabile.

Proposizione 12.1 (Proprietà del trasporto non bilanciato).

Il funzionale $UOT_\varepsilon(\mu,\nu)$ soddisfa le seguenti proprietà: (i) è simmetrico in (μ,ν); (ii) $UOT_\varepsilon(\mu,\mu) = 0$ per ogni μ; (iii) per $\tau \to \infty$, $UOT_\varepsilon(\mu,\nu) \to OT_\varepsilon(\mu,\nu)$; (iv) per $\tau \to 0$, $UOT_\varepsilon(\mu,\nu) \to \varepsilon\, KL(\mu\otimes\nu \mid \mu\otimes\nu) = 0$ (la massa viene totalmente ignorata); (v) UOT_ε è 1-Lipschitz rispetto alla norma di variazione totale: $|UOT_\varepsilon(\mu,\nu) - UOT_\varepsilon(\mu',\nu')| \leq C(\varepsilon,\tau) \cdot (\|\mu-\mu'\|_{TV} + \|\nu-\nu'\|_{TV})$, con costante C uniformemente limitata in ε, τ.

Dimostrazione. (i) e (ii) seguono dalla costruzione simmetrica del funzionale. (iii) e (iv) seguono dal fatto che per $\tau \to \infty$ i termini di penalizzazione domettono la divergenza, forzando le marginali esatte; per $\tau \to 0$, la penalizzazione diventa zero indipendentemente dalle marginali. (v) è una conseguenza della dualità di Kantorovich per UOT, che fornisce una rappresentazione del tipo $UOT_\varepsilon(\mu,\nu) = \sup_{\varphi,\psi:\ \varphi(x)+\psi(y)\leq c(x,y)} \{ \tau \int (1 - e^{\varphi/\tau})\, d\mu + \tau \int (1 - e^{\psi/\tau})\, d\nu \}$, da cui la 1-Lipschitzianità rispetto alle misure segue dall'uniformità dei duali ottimali. □

Capitolo 13 — Score Matching, Flow Matching e Trasporto Ottimale nei Modelli Generativi

I modelli generativi profondi — Variational Autoencoders, Generative Adversarial Networks, Normalizing Flows, Diffusion Models, Flow Matching — hanno trasformato radicalmente le capacità di generazione di contenuti artificiali negli anni 2014–2024. Questo capitolo analizza le connessioni matematiche tra questi modelli e il trasporto ottimale, approfondendo la sezione 8.3 del Capitolo 8 e introducendo nuovi sviluppi: lo score matching come stima del gradiente dell'entropia di Wasserstein, il Flow Matching come interpolazione lineare tra distribuzioni, il Rectified Flow come algoritmo di raddrizzamento delle traiettorie di trasporto, e la distanza di Wasserstein sliced per calcoli scalabili in alta dimensione.

13.1 Score Matching come Stima del Gradiente di Wasserstein

Lo score matching, introdotto da Hyvärinen nel 2005 come metodo di stima non normalizzato per modelli probabilistici, ha trovato applicazione straordinaria nei modelli di diffusione come metodo per apprendere il campo di forza $\nabla_x \log p_t(x)$ (lo score della distribuzione al tempo t) direttamente dai dati, senza calcolare la funzione di partizione. La connessione con il trasporto ottimale risiede nel fatto che lo score $\nabla \log p$ è esattamente il gradiente negativo di Wasserstein del funzionale di entropia $H(p) = \int p \log p \, dx$ rispetto alla metrica W_2.

Più precisamente, dalla formula per il gradiente di Wasserstein (derivata nel Capitolo 5): $\mathrm{grad}_{W_2} H(p)(x) = \nabla_x \log p(x)$. L'equazione del flusso gradiente $\partial_t p = -\mathrm{div}(p \cdot \mathrm{grad}_{W_2} H) = \Delta p$ è dunque il calore. Per il funzionale di entropia relativa $KL(p \mid p^*) = \int p \log(p/p^*)\, dx$ rispetto a una distribuzione target $p^* = e^{-V}/Z$, $\mathrm{grad}_{W_2} KL(p|p^*)(x) = \nabla_x \log(p(x)/p^*(x)) = \nabla_x \log p(x) - \nabla_x \log p^*(x) = \nabla_x \log p(x) + \nabla V(x)$. Il flusso gradiente di $KL(\cdot|p^*)$ è dunque l'equazione di Fokker–Planck $\partial_t p = \mathrm{div}(p(\nabla \log p + \nabla V)) = \Delta p + \mathrm{div}(p \nabla V)$, confermando la connessione JKO del Capitolo 8.

Il denoising score matching (DSM), proposta da Vincent (2011) e utilizzata nei DDPM, evita il calcolo diretto di $\nabla \log p_t$ addestando invece una rete neurale $s_\theta(x, t)$ a minimizzare l'obiettivo

$$L_{DSM}(\theta) := \mathbb{E}_{t, x_0, x_t} [\| s_\theta(x_t, t) - \nabla_{x_t} \log p_{t|0}(x_t \mid x_0) \|^2],$$

dove $p_{t|0}(x_t|x_0)$ è la distribuzione condizionale delle traiettorie del processo di diffusione dato x_0. Per il processo di Ornstein–Uhlenbeck, $p_{t|0}(x_t|x_0) = \mathcal{N}(e^{-t/2} x_0, (1-e^{-t}) I)$, dunque $\nabla_{x_t} \log p_{t|0}(x_t|x_0) = -(x_t - e^{-t/2} x_0)/(1-e^{-t})$, che è il campo di "denoising" che punta da x_t verso x_0. Il teorema di Vincent–Song (2011) afferma che, sotto condizioni di integrabilità, il minimizzatore di L_{DSM} è uguale allo score $\nabla \log p_t$ q.o., ossia $s_{\theta^*}(x,t) = \nabla_x \log p_t(x)$. Questo è un teorema di completezza dell'obiettivo di DSM: il minimo globale identifica correttamente il gradiente dell'entropia di Wasserstein.

Teorema 13.1 (Completezza del Denoising Score Matching, Song–Ermon 2019).

Sia $\{p_t\}_{t\geq 0}$ la famiglia di distribuzioni marginali del processo di Ornstein–Uhlenbeck $dx_t = -x_t/2\, dt + dW_t$. Assumendo $\int_0^T \mathbb{E}_{x_t}[\|\nabla \log p_t(x_t)\|^2]\, dt < \infty$, il funzionale $L_{DSM}(\theta)$ ha come minimo (tra tutti i campi misurabili s_θ) la funzione $s^*(x,t) = \nabla_x \log p_t(x)$, e

$$L_{DSM}(s^*) = \mathbb{E}_{t, x_0, x_t}[\|\nabla_{x_t} \log p_{t|0}(x_t|x_0) - \nabla_{x_t} \log p_t(x_t)\|^2] \cdot \ldots = C$$

dove $C = \int_0^T \mathbb{E}[\|\nabla \log p_t(x_t)\|^2]\, dt - L_{DSM}(s^*)$ è una costante indipendente da θ che non influenza l'ottimizzazione. In particolare, minimizzare $L_{DSM}(\theta)$ è equivalente a minimizzare la distanza L^2 tra s_θ e lo score $\nabla \log p_t$.

Dimostrazione. Si espande $\|s_\theta(x_t,t) - \nabla_{x_t} \log p_{t|0}(x_t|x_0)\|^2 = \|s_\theta - \nabla \log p_t\|^2 + 2\langle s_\theta - \nabla \log p_t, \nabla \log p_t - \nabla \log p_{t|0}\rangle + \|\nabla \log p_t - \nabla \log p_{t|0}\|^2$. Prendendo l'aspettazione su (x_0, x_t), il termine misto si annulla per la proprietà di martingala: $\mathbb{E}[\langle s_\theta(x_t), \nabla \log p_t(x_t) - \nabla \log p_{t|0}(x_t|x_0)\rangle] = 0$, che segue dall'uguaglianza $p_t(x_t) = \int p_{t|0}(x_t|x_0)\, p_0(x_0)\, dx_0$ e dalla formula $\nabla \log p_t(x_t) = \int \nabla \log p_{t|0}(x_t|x_0)\, p_{0|t}(x_0|x_t)\, dx_0$ (il che mostra che $\nabla \log p_t$ è la media condizionale di $\nabla \log p_{t|0}$). Il termine $\|\nabla \log p_t - \nabla \log p_{t|0}\|^2$ è una costante dipendente solo dalla dinamica del processo e da p_0, non da θ. Dunque $L_{DSM}(\theta) = \|s_\theta - \nabla \log p_t\|^2_{L^2(p_t\, dt)} + C$, e la minimizzazione di L_{DSM} coincide con quella di $\|s_\theta - \nabla \log p_t\|^2$. □

13.2 Flow Matching e Rectified Flow

I modelli di diffusione addestrono $s_\theta \approx \nabla \log p_t$ e poi simulano la SDE inversa per generare campioni da $p_0 = p_{data}$. Un approccio alternativo, proposto simultaneamente da Liu et al. (Rectified Flow, 2022) e Lipman et al. (Flow Matching, 2022), evita la SDE stocastica e mira direttamente a un campo di velocità $v_\theta(x,t)$ che, integrato come ODE $dx/dt = v_\theta(x,t)$, trasporti la distribuzione iniziale $p_T = \mathcal{N}(0,I)$ verso la distribuzione target $p_0 = p_{data}$. La connessione con il trasporto ottimale è la seguente: il campo di velocità ottimale (quello che minimizza il costo di trasporto W_2^2) è esattamente il cammino geodetico di McCann con campo di velocità $v^*_t = (T^* - id) / (1-t)$ dove T^* è la mappa di Brenier da p_T a p_0.

L'obiettivo di Flow Matching, dato un cammino di interpolazione $x_t = (1-t)x_0 + tx_T$ con $x_0 \sim p_0$ e $x_T \sim \mathcal{N}(0,I)$ indipendenti, è

$$L_{FM}(\theta) := \mathbb{E}_{t, x_0, x_T} [\|v_\theta(x_t, t) - (x_T - x_0)\|^2],$$

dove $x_T - x_0$ è il vettore di velocità "rettilinea" tra il punto di rumore x_T e il dato reale x_0. Il minimizzatore di L_{FM} è il campo di velocità condizionale $v^*(x,t) = \mathbb{E}[x_T - x_0 \mid x_t = x]$, che è la media del vettore di velocità rettilineo condizionata alla posizione x al tempo t. L'obiettivo L_{FM} è equivalente (fino a costante) all'obiettivo di Conditional Flow Matching (CFM) di Lipman et al., che è calcolabile in modo efficiente senza integrare l'ODE forward.

Il Rectified Flow di Liu et al. aggiunge un passo di raddrizzamento: dopo aver addestrato un modello v_θ tramite L_{FM}, si generano coppie

(x_0, x_T) accoppiate ottimalmente (seguendo le traiettorie del modello addestrato piuttosto che usando coppie indipendenti), e si riaddestrail modello su queste coppie accoppiate. Questo processo iterativo (reflow) converge a un campo di velocità sempre più rettilineo, riducendo la curvatura delle traiettorie e migliorando l'efficienza della generazione (le ODE rettilinee possono essere integrate con meno passi). Il Rectified Flow con un passo di reflow produce traiettorie quasi-geodetiche nel senso del trasporto ottimale W_2, avvicinandosi al cammino di McCann.

Teorema 13.2 (Convergenza del Rectified Flow verso il trasporto ottimale).

Sia v^{(k)}_θ il campo di velocità addestrato dopo k passi di reflow, e (X_0^{(k)}, X_T^{(k)}) le coppie generate. Se $p_0 \ll L^d$ (misura assolutamente continua), allora: (i) il costo di trasporto $W_2^2(p_0, p_T) \geq W_2^2_k$ dove $W_2^2_k := \mathbb{E}[\|X_0^{(k)} - X_T^{(k)}\|^2]$ è non crescente in k; (ii) per ogni k, la distribuzione congiunta di (X_0^{(k)}, X_T^{(k)}) è un piano di trasporto in $\Pi(p_0, p_T)$ con costo $W_2^2_k$; (iii) $W_2^2_k \to W_2^2(p_0, p_T)$ (il costo converge al minimo ottimale).

Dimostrazione. (i) Ogni passo di reflow riduce il costo: le coppie al passo k sono generate da v^{(k)}, e il riaddestramentoproduce v^{(k+1)} con costo non superiore a W_2^2_k poiché v^{(k+1)} trasporta la distribuzione generata da v^{(k)}. (ii) La distribuzione di (X_0^{(k)}, X_T^{(k)}) ha marginali p_0 e p_T per costruzione (le traiettorie partono da p_T e arrivano a p_0). (iii) Poiché W_2^2_k è non crescente e limitato inferiormente da $W_2^2(p_0,p_T)$, converge; il limite è il valore ottimale perché ogni passo di reflow avvicina la

distribuzione congiunta al piano ottimale (argomento di compattezza: la sequenza di piani è equistretta e ogni punto di accumulazione è un piano ottimale di Kantorovich per $p \ll L^d$, che è unico e coincide con il piano di Brenier). □

13.3 Trasporto Ottimale per l'Adattamento di Dominio

L'adattamento di dominio (domain adaptation) è il problema di trasferire un modello addestrato su una distribuzione sorgente p_S a una distribuzione target p_T, dove le due distribuzioni differiscono in modo sistematico (covariata shift). Il trasporto ottimale fornisce una soluzione naturale: si cerca la mappa $T^* : \mathrm{spt}(p_S) \to \mathrm{spt}(p_T)$ che minimizza il costo di trasporto $W_2(p_S, p_T)$ e si trasformano i dati sorgente $x \mapsto T^*(x)$ prima dell'applicazione del modello. Questa strategia è stata sistematizzata da Courty, Flamary e collaboratori (2017) nell'ambito del trasporto ottimale per l'apprendimento automatico.

Il vantaggio teorico dell'approccio di trasporto ottimale rispetto ad altri metodi di adattamento (come la minimizzazione della divergenza KL o della variazione totale) è la sensibilità alla geometria: la mappa di Brenier preserva la struttura locale delle distribuzioni (vicini nella distribuzione sorgente vengono trasportati in vicini nella distribuzione target), il che è desiderabile quando il covariata shift è una deformazione regolare dello spazio delle feature piuttosto che un rimescolamento casuale. In questo senso, il trasporto ottimale implementa il principio di Continuity of Learning: le strutture apprese dal modello rimangono valide dopo la trasformazione se la trasformazione stessa è lipschitziana.

In dimensione alta ($d \gg 1$), il calcolo diretto di T^* tramite l'algoritmo di Sinkhorn scala come $O(N^2 d)$ e può essere proibitivo. Una strategia popolare è la

distanza di Wasserstein sliced (SWD), che approssima W_2 tramite una media di distanze di Wasserstein monodimensionali su proiezioni casuali:

$$SW_2^2(\mu,\nu) := \mathbb{E}_{\theta \sim Unif(S^{d-1})} [W_2^2(\theta_\#\mu, \theta_\#\nu)],$$

dove $\theta_\#\mu$ è la proiezione di μ sulla direzione θ. Poiché W_2 tra misure unidimensionali si calcola in $O(N \log N)$ tramite la funzione di distribuzione cumulativa, SWD è calcolabile in $O(N \log N \cdot K)$ dove K è il numero di proiezioni casuali. SWD non è una distanza nel senso stretto (non soddisfa la disuguaglianza triangolare in generale), ma è una pseudo-distanza che metrizza la convergenza debole su $\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^d)$ ed è consistente con W_2 nel senso che $SW_2 \to 0$ se e soltanto se $W_2 \to 0$.

Teorema 13.3 (Proprietà della distanza Wasserstein sliced).

La distanza SW_2 definita sopra soddisfa: (i) $SW_2(\mu,\nu) = 0 \Leftrightarrow \mu = \nu$ (separazione dei punti); (ii) $SW_2 \leq W_2$ (la distanza sliced non supera la distanza di Wasserstein); (iii) per misure supportate su una sottovarietà k-dimensionale liscio $M \subset \mathbb{R}^d$, $SW_2(\mu,\nu) \geq c(k,d) \cdot W_2^{k/(k+1)}(\mu,\nu)$ (lower bound dipendente dalla dimensione della sottovarietà); (iv) la varianza della stima Monte Carlo di SW_2^2 tramite K proiezioni casuali è $O(1/K)$, uniformemente sulle misure in $\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^d)$.

Dimostrazione. (i) Se $SW_2(\mu,\nu) = 0$, allora $W_2(\theta_\#\mu, \theta_\#\nu) = 0$ per q.o. θ, dunque $\theta_\#\mu = \theta_\#\nu$ per q.o. θ. Poiché le trasformate di Radon unidimensionali $\theta_\#\mu$ determinano μ in modo unico (per il teorema di inversione di Radon), si conclude $\mu = \nu$. (ii) Per ogni piano $\gamma \in \Pi(\mu,\nu)$, la proiezione $(\theta,\theta)_\#\gamma$ appartiene a $\Pi(\theta_\#\mu, \theta_\#\nu)$ e ha costo $W_2^2(\theta_\#\mu, \theta_\#\nu) \leq \int |\theta\cdot(x-y)|^2 \, d\gamma(x,y) \leq \int \|x-y\|^2 \, d\gamma$ (per Cauchy-Schwarz). Prendendo il piano ottimale γ^* e

l'aspettazione su θ: $SW_2^2 \leq W_2^2(\mu,\nu)$. (iii) è una stima più sottile che richiede la geometria della sottovarietà M (ogni proiezione $\theta \in S^{d-1}$ non degenere induce un diffeomorfismo su M). (iv) segue dalla legge dei grandi numeri per variabili i.i.d. con varianza finita. □

13.4 Trasporto Ottimale Neurale e Formulazione Variazionale

Il trasporto ottimale neurale (Neural Optimal Transport, NOT) è un approccio recente che utilizza reti neurali per approssimare sia la mappa di trasporto ottimale T* sia i potenziali duali ottimali φ*, ψ*, addestrandoli simultaneamente tramite la dualità di Kantorovich. L'obiettivo è la riformulazione parametrica della dualità:

$$W_2^2(\mu,\nu) = \max_{\varphi \in ICNN,\ \psi = \varphi^c} \{ \int \varphi \, d\mu + \int \psi \, d\nu \},$$

dove ICNN denota le reti neurali Input-Convex (Input-Convex Neural Networks, Amos et al. 2017): reti neurali con pesi non negativi in tutti gli strati tranne il primo e funzioni di attivazione convesse, che implementano funzioni convesse di x per ogni configurazione dei pesi. Le ICNN sono la classe di funzioni parametriche naturale per approssimare la funzione di Brenier φ*, poiché la convessità di φ* è garantita per costruzione.

L'addestramento avviene tramite discesa del gradiente stocastic (SGD) alternato: si aggiorna φ_θ per massimizzare $\int \varphi_\theta \, d\mu + \int \varphi_\theta^c \, d\nu$ (dove $\varphi_\theta^c(y) = \inf_x \{c(x,y) - \varphi_\theta(x)\}$ è calcolata tramite una rete separata), e si deduce la mappa di trasporto $T^*(x) = \nabla \varphi^*(x)$ come gradiente della ICNN ottimale. Korotin et al. (2021) hanno dimostrato che questo approccio converge alla distanza di Wasserstein esatta per classi di distribuzioni log-concave, con un rate di approssimazione che scala favorevolmente con la dimensione d rispetto agli approcci basati su Sinkhorn puro (il bias di ottimizzazione delle ICNN scala come $d^{1/2}$ piuttosto che esponenzialmente in d).

Una variante particolarmente efficace è il metodo W2GN (Wasserstein-2 Gradient Networks) di Makkuva et al. (2020), che sfrutta la relazione $T^* = \nabla\varphi^*$ e l'identità della trasformata di Legendre $(T^*)^{-1} = \nabla(\varphi^*)^*$: si addestrano simultaneamente due ICNN φ_θ e ψ_ω per la mappa diretta e inversa, imponendo la condizione di coniugio tramite la penalizzazione $\lambda \|\nabla\varphi_\theta \circ \nabla\psi_\omega - \mathrm{id}\|^2_{L^2(\nu)} \to 0$. Questo approccio a mappa invertibile garantisce la biettività del trasporto approssimato e permette calcoli sia in avanti (da μ a ν) sia in indietro (da ν a μ), il che è essenziale per applicazioni di generazione condizionale e di stile trasferimento.

Il trasporto ottimale neurale apre il collegamento tra il trasporto ottimale e la teoria moderna dei generatori profondi, chiudendo il cerchio aperto dal Wasserstein GAN del Capitolo 8: mentre il WGAN addestra il discriminatore come funzione 1-Lipschitz nella rappresentazione duale di W_1, il trasporto ottimale neurale addestra la funzione convessa φ nella rappresentazione duale di W_2, producendo esplicitamente la mappa di trasporto ottimale $T^* = \nabla\varphi$ come subprodotto dell'addestramento. Questo permette di generare campioni da ν conoscendo campioni da μ tramite T^*, di calcolare log-verosimiglianze tramite la formula di cambio di variabili $\log\det(\nabla^2\varphi) = \log(f/g(\nabla\varphi))$ (equazione di Monge–Ampère), e di valutare la qualità del generatore tramite la distanza W_2 senza richiedere una funzione di perdita surrogata.

Appendice A — Notazioni e Convenzioni

Nel corso della monografia si adottano le seguenti convenzioni notazionali. Gli spazi metrici vengono indicati con (X, d) o semplicemente X quando la metrica è sottintesa. La misura di Lebesgue n-dimensionale è L^n, e si scrive $\mu \ll L^n$ per indicare che μ è assolutamente continua rispetto ad essa. L'insieme delle misure di probabilità su X è $\mathscr{P}(X)$, e $\mathscr{P}_p(X)$ è il suo sottoinsieme delle misure con momento p-esimo finito. La convergenza stretta di misure è indicata con $\rightharpoonup$, da non confondere con la convergenza debole in spazi di Banach.

Per una funzione $f : X \to \mathbb{R}$, Lip(f) denota la costante di Lipschitz; per una matrice quadrata A, det(A) e tr(A) sono rispettivamente il determinante e la traccia. Il prodotto scalare in $\mathbb{R}^n$ è indicato con $\cdot$ o con $\langle \cdot, \cdot \rangle$; la norma euclidea con $|\cdot|$. Per una funzione convessa φ, $\partial\varphi(x)$ denota il sottodifferenziale in x nel senso dell'analisi convessa; $\nabla\varphi$ denota il gradiente classico quando φ è differenziabile. Il push-forward di μ tramite T è $T_{\#}\mu$. Le sigle KL, OT, JKO abbreviano rispettivamente Kullback–Leibler, Optimal Transport e Jordan–Kinderlehrer–Otto. Le abbreviazioni q.o. e q.s. significano quasi ovunque e quasi sicuramente, usate indifferentemente a seconda del contesto analitico o probabilistico.

Per i funzionali su $\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n)$, i gradienti di Wasserstein sono indicati con grad_W. La disintegrazione di γ rispetto a π_X è denotata con $(\gamma_x)_{x \in X}$. Le sezioni di una funzione convessa φ al livello h attorno a x_0 sono $S_h(x_0)$. Per i potenziali entropici di Schrödinger si usa la notazione $(\varphi_\varepsilon, \psi_\varepsilon)$ o equivalentemente $(u, v) = (\exp(\varphi_\varepsilon/\varepsilon), \exp(\psi_\varepsilon/\varepsilon))$ nella forma esponenziale. Il nucleo di Gibbs è $K(x,y) = \exp(-c(x,y)/\varepsilon)$.

Appendice B — Richiami di Analisi Funzionale e Teoria della Misura

La presente appendice raccoglie i risultati di analisi funzionale e teoria della misura che vengono citati nel corpo della monografia senza dimostrazione, e per i quali si rinvia ai testi classici indicati nella bibliografia. Lo scopo è rendere il testo auto-contenuto per un lettore che abbia già studiato misura e integrazione a livello magistrale, ma desideri avere a portata di mano le formulazioni precise dei risultati utilizzati.

B.1 Spazi di Hilbert e Operatori Lineari

Uno spazio di Hilbert H è uno spazio vettoriale reale (o complesso) dotato di un prodotto interno $\langle \cdot,\cdot \rangle$ che lo rende completo rispetto alla norma $\|x\| = \langle x,x \rangle^{1/2}$. Il teorema di rappresentazione di Riesz afferma che ogni funzionale lineare continuo $\varphi : H \to \mathbb{R}$ è della forma $\varphi(x) = \langle x, y \rangle$ per un unico $y \in H$. La proiezione ortogonale su un sottospazio chiuso $C \subset H$ esiste ed è unica: per ogni $x \in H$ esiste un unico $P_C(x) \in C$ tale che $\|x - P_C(x)\| = \mathrm{dist}(x, C)$. Il teorema di Banach-Alaoglu afferma che la palla unitaria di un spazio di Banach è compatta nella topologia debole*; applicato agli spazi di Hilbert, implica che ogni successione limitata ammette una sottosuccessione debolmente convergente.

Un operatore lineare $T : H \to K$ tra spazi di Hilbert è detto di Hilbert-Schmidt se esiste una base ortonormale $\{e_n\}$ di H tale che $\sum_n \|Te_n\|^2 < \infty$; in questo caso la norma di Hilbert-Schmidt $\|T\|_{HS} = (\sum_n \|Te_n\|^2)^{1/2}$ è indipendente dalla base scelta. Gli operatori integrali $T f(x) = \int K(x,y)\, f(y)\, dy$ con nucleo $K \in L^2(X \times Y)$ sono di Hilbert-Schmidt

con $\|T\|_{HS} = \|K\|_{L^2}$. Il teorema spettrale per operatori autoaggiunti compatti su spazi di Hilbert separabili afferma che tali operatori ammettono una base ortonormale di autovettori con autovalori reali che si accumulano solo in zero.

B.2 Spazi L^p e Dualità

Per una misura σ-finita $(\Omega, \mathcal{F}, \mu)$ e $1 \leq p < \infty$, lo spazio $L^p(\mu)$ è completo (teorema di Riesz-Fischer) e separabile se μ è separabile (nel senso che $L^2(\mu)$ è separabile). Il duale di $L^p(\mu)$ per $1 < p < \infty$ è identificato con $L^q(\mu)$ tramite la coppia $\langle f,g \rangle = \int fg \, d\mu$ (teorema di rappresentazione di Riesz-Thorin), dove $1/p + 1/q = 1$. Il duale di $L^1(\mu)$ è $L^\infty(\mu)$ quando μ è σ-finita. La disuguaglianza di Young afferma che per $1/p + 1/q = 1$ si ha $ab \leq a^p/p + b^q/q$ per ogni $a,b \geq 0$, e la disuguaglianza di Hölder $\|fg\|_{L^1} \leq \|f\|_{L^p} \|g\|_{L^q}$ ne è la versione integrale. La disuguaglianza di Minkowski garantisce che $\|f+g\|_{L^p} \leq \|f\|_{L^p} + \|g\|_{L^p}$.

Il teorema di interpolazione di Riesz-Thorin afferma che se T è un operatore lineare continuo da L^{p_0} a L^{q_0} e da L^{p_1} a L^{q_1}, allora è continuo da L^{p_θ} a L^{q_θ} per ogni $\theta \in [0,1]$, dove $1/p_\theta = (1-\theta)/p_0 + \theta/p_1$ e analogamente per q_θ. La disuguaglianza di Poincaré, nelle sue varie forme, controlla la norma L^2 di una funzione in termini della norma L^2 del suo gradiente, ed è uno strumento essenziale nelle stime a priori per PDE ellittiche.

B.3 Teoremi di Compattezza e Convergenza

Il lemma di Fatou afferma che per una successione di funzioni misurabili non negative $f_n \geq 0$, $\int \liminf f_n \leq \liminf \int f_n$. Il teorema di Beppo Levi (convergenza monotona) afferma che se $0 \leq f_n \nearrow f$ monotonamente, allora $\int f_n \to \int f$. Il teorema di convergenza dominata di Lebesgue afferma che se $f_n \to f$ q.o. e $|f_n| \leq g$ con $g \in L^1(\mu)$, allora $\int f_n \to \int f$. Il teorema di Egorov afferma che su un insieme di misura finita, la convergenza q.o. implica la convergenza quasi uniforme (uniforme su insiemi di misura arbitrariamente vicina al totale).

Il teorema di Arzelà-Ascoli afferma che una famiglia di funzioni equicontinua e puntualmente limitata su un compatto è relativamente compatta nello spazio $C(K)$ delle funzioni continue. Il teorema di Dunford-Pettis caratterizza la compattezza debole in L^1: una famiglia $\mathcal{F} \subset L^1(\mu)$ è relativamente compatta nella topologia debole se e soltanto se è equiintegrabile, ovvero $\sup_{f \in \mathcal{F}} \int_{|f|>M} |f| \, d\mu \to 0$ per $M \to \infty$. Questo risultato è cruciale nella dimostrazione della semicontinuità inferiore dei funzionali integrali rispetto alla convergenza debole.

B.4 Misure su Spazi Prodotto e Teorema di Fubini-Tonelli

Per due spazi misurabili $(X, \mathcal{F})$ e $(Y, \mathcal{G})$, la σ-algebra prodotto $\mathcal{F} \otimes \mathcal{G}$ è la più piccola σ-algebra su $X \times Y$ che rende misurabili entrambe le proiezioni. Per misure σ-finite μ su X e ν su Y, esiste un'unica misura prodotto $\mu \otimes \nu$ su $(X \times Y, \mathcal{F} \otimes \mathcal{G})$ tale che $(\mu \otimes \nu)(A \times B) = \mu(A) \cdot \nu(B)$. Il teorema di Fubini-Tonelli afferma che per funzioni $f \geq 0$ misurabili, l'integrale rispetto alla misura prodotto si calcola iterando: $\int_{X \times Y} f \, d(\mu \otimes$

$\nu) = \int_X (\int_Y f(x,y)\, d\nu(y))\, d\mu(x)$, e che la stessa formula vale per $f \in L^1(\mu \otimes \nu)$ (Fubini). La generalizzazione di Fubini al caso di misure non prodotto è esattamente il teorema di disintegrazione di Rokhlin (Teorema 1.4).

La misura di Borel su $\mathbb{R}^n$ è la misura di Lebesgue L^n, unica (a meno di costanti) misura di Radon su $\mathbb{R}^n$ invariante per traslazioni. Il teorema di Radon-Nikodým afferma che se $\nu \ll \mu$ (ν è assolutamente continua rispetto a μ), esiste un'unica funzione μ-misurabile non negativa $d\nu/d\mu$ (la derivata di Radon-Nikodým) tale che $\nu(A) = \int_A (d\nu/d\mu)\, d\mu$ per ogni boreliano A. Il teorema di decomposizione di Lebesgue afferma che ogni misura di Borel σ-finita su $\mathbb{R}^n$ si decompone in modo unico come somma di una componente assolutamente continua e di una componente singolare rispetto a L^n.

Appendice C — Elementi di Geometria Convessa e Funzioni Convesse

Questa appendice richiama le proprietà fondamentali delle funzioni convesse e degli insiemi convessi che sono alla base della teoria del trasporto ottimale, con particolare attenzione alle nozioni di subdifferenziale, trasformata di Legendre-Fenchel e teorema di Aleksandrov, che rivestono un ruolo centrale nelle dimostrazioni del Capitolo 2 e del Capitolo 6.

C.1 Insiemi Convessi e Funzioni Convesse

Un insieme $C \subset \mathbb{R}^n$ è convesso se per ogni $x, y \in C$ e ogni $t \in [0,1]$ si ha $(1-t)x + ty \in C$. Una funzione $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ è convessa se $f((1-t)x + ty) \leq (1-t)f(x) + tf(y)$ per ogni $x, y \in \mathrm{dom}(f) := \{x : f(x) < +\infty\}$ e ogni $t \in [0,1]$. Il dominio efficace dom(f) di una funzione convessa propria (non identicamente $+\infty$) è un insieme convesso. Una funzione convessa è localmente lipschitziana nell'interno di dom(f): per ogni compatto $K \subset \mathrm{int}(\mathrm{dom}(f))$ esiste L > 0 tale che $|f(x) - f(y)| \leq L\|x-y\|$ per ogni $x, y \in K$.

Il teorema di Carathéodory afferma che ogni punto dell'inviluppo convesso di un insieme $S \subset \mathbb{R}^n$ si esprime come combinazione convessa di al più n+1 punti di S. Il teorema di separazione degli iperiani afferma che due insiemi convessi disgiunti possono essere separati da un iperpiano: se C e D sono convessi e disgiunti, esiste un vettore normale v e una costante c tali che $\langle v,x\rangle \leq c \leq \langle v,y\rangle$ per ogni $x \in C$ e $y \in D$. Nella forma forte, se C è

chiuso e D è compatto (e $C \cap D = \varnothing$), la separazione è stretta: esiste δ > 0 tale che $\langle v,x \rangle \leq c - \delta$ per ogni $x \in C$.

C.2 Subdifferenziale e Monotonia Ciclica

Per una funzione convessa propria $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ e un punto $x \in \mathrm{dom}(f)$, il subdifferenziale di f in x è il sottoinsieme di $\mathbb{R}^n$ definito da $\partial f(x) := \{p \in \mathbb{R}^n : f(y) \geq f(x) + \langle p, y-x \rangle$ per ogni $y \in \mathbb{R}^n\}$. Gli elementi di $\partial f(x)$ sono detti subgradienti di f in x. Il subdifferenziale $\partial f(x)$ è un insieme convesso chiuso (eventualmente vuoto fuori da dom(f)), ed è un singoletto $\{\nabla f(x)\}$ nei punti in cui f è differenziabile. La condizione $p \in \partial f(x)$ è equivalente all'ineguaglianza di Fenchel-Young: $f(x) + f^*(p) = \langle x,p \rangle$, dove f^* è la trasformata di Legendre-Fenchel.

Un operatore multivalore $T : \mathbb{R}^n \Rightarrow \mathbb{R}^n$ si dice monotono se $\langle p-q, x-y \rangle \geq 0$ per ogni $(x,p), (y,q) \in \mathrm{graph}(T)$, e massimalmente monotono se non è possibile estenderlo a un operatore monotono strettamente più grande. Il teorema di Minty afferma che T è massimalmente monotono se e soltanto se Id + T è suriettivo (equivalentemente, (Id + T)^{−1} è un'applicazione definita su tutto $\mathbb{R}^n$). Il subdifferenziale ∂f di una funzione convessa propria chiusa è un operatore massimalmente monotono. Il teorema di Rockafellar del 1966 caratterizza gli operatori ciclicamente monotoni come subdifferenziali di funzioni convesse: un operatore multivalore T è il subdifferenziale di una funzione convessa propria chiusa se e soltanto se il suo grafico è ciclicamente monotono nel senso della Sezione 3.5.

C.3 La Trasformata di Legendre-Fenchel

Per una funzione convessa propria chiusa $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, la trasformata di Legendre-Fenchel (o coniugata convessa) è la funzione $f^* : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ definita da $f^*(p) := \sup_{x \in \mathbb{R}^n} \{\langle x,p\rangle - f(x)\}$. La funzione f^* è sempre convessa propria chiusa (come supremo di funzioni affini). La doppia trasformata verifica $(f^*)^* = f$ (involuzione di Legendre-Fenchel). Le coppie (x,p) con $p \in \partial f(x)$ e $x \in \partial f^*(p)$ sono legate dalla dualità di Fenchel: $f(x) + f^*(p) = \langle x,p\rangle$. Per $f(x) = \|x\|^2/2$ si ha $f^*(p) = \|p\|^2/2$ (la gaussiana è autopolare); per $f(x) = \|x\|$ si ha $f^*(p) = 0$ se $\|p\| \leq 1$ e $+\infty$ altrimenti.

Per il costo quadratico $c(x,y) = \|x-y\|^2/2$, la c-trasformata di Kantorovich di una funzione φ è legata alla trasformata di Legendre-Fenchel da $\varphi^c(y) = \inf_x \{\|x-y\|^2/2 - \varphi(x)\} = \|y\|^2/2 - \sup_x \{\langle x,y\rangle - \varphi(x) - \|x\|^2/2\} = \|y\|^2/2 - (\varphi + \|\cdot\|^2/2)^*(y)$. La c-concavità di φ per il costo quadratico equivale dunque alla condizione che $x \mapsto \varphi(x) + \|x\|^2/2$ sia convessa, il che connette direttamente i potenziali duali di Kantorovich alle funzioni convesse del Teorema di Brenier.

C.4 Il Teorema di Aleksandrov sulle Funzioni Convesse

Il teorema di Aleksandrov del 1939 è il risultato di regolarità fondamentale per le funzioni convesse: ogni funzione convessa $f : \Omega \to \mathbb{R}$ su un aperto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ è due volte differenziabile nel senso di Aleksandrov quasi ovunque, ossia per L^n-quasi ogni $x_0 \in \Omega$ esiste una matrice simmetrica semidefinita positiva $H(x_0)$ (la hessiana generalizzata di

Aleksandrov) tale che $f(x_0+h) = f(x_0) + \langle \nabla f(x_0), h\rangle + (1/2)\langle H(x_0)h, h\rangle + o(\|h\|^2)$ per $h \to 0$.

La dimostrazione del teorema di Aleksandrov si basa su due passi: prima si mostra che il subdifferenziale multivalore ∂f è monotono e quindi ha una regolarità lipschitziana quasi ovunque (nel senso di Rademacher per mappe multivalori); poi si verifica che la lipschitzianità di ∂f in un punto x_0 implica la differenziabilità di ∇f (e quindi la doppia differenziabilità di f) in x_0. Una conseguenza importante è che la misura di Monge-Ampère $\mu[f] = (\nabla f)_\# L^n$ è assolutamente continua rispetto a L^n, con densità det H(x), per ogni funzione convessa con $\nabla f \ll L^n$. Questo risultato, combinato con la formula di cambio di variabili, giustifica rigorosamente la derivazione dell'equazione di Monge-Ampère nel Capitolo 6.

Bibliografia

Si elencano di seguito le referenze principali citate nella monografia, organizzate per capitolo. La letteratura sul trasporto ottimale è vasta e in rapida crescita; per una rassegna esaustiva si rimanda ai libri di testo di Villani [V1, V2] e Santambrogio [S], che coprono in modo sistematico sia gli aspetti teorici sia quelli applicativi. Le note ai capitoli originali della monografia segnalano ulteriori referenze per gli sviluppi non trattati nel presente testo.

Testi Fondamentali e Monografie

[AGS] Ambrosio, L., Gigli, N., Savaré, G. (2005). Gradient Flows in Metric Spaces and in the Space of Probability Measures. Birkhäuser, Basel. — Testo di riferimento per la teoria dei flussi gradiente in spazi metrici, spazi di Wasserstein e curve assolutamente continue.

[V1] Villani, C. (2003). Topics in Optimal Transportation. Graduate Studies in Mathematics, vol. 58. American Mathematical Society, Providence. — Prima monografia sistematica in inglese sulla teoria del trasporto ottimale, con trattazione completa della dualità di Kantorovich e della distanza di Wasserstein.

[V2] Villani, C. (2009). Optimal Transport: Old and New. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, vol. 338. Springer, Berlin. — Trattazione enciclopedica che copre anche la geometria degli spazi metrici di misura e le disuguaglianze funzionali.

[S] Santambrogio, F. (2015). Optimal Transport for Applied Mathematicians. Progress in Nonlinear Differential Equations and

Their Applications, vol. 87. Birkhäuser. — Testo moderno orientato alle applicazioni: calcolo delle variazioni, PDE, algoritmi numerici.

[PC] Peyré, G., Cuturi, M. (2019). Computational Optimal Transport. Foundations and Trends in Machine Learning, vol. 11, no. 5–6, pp. 355–607. — Trattazione completa degli aspetti computazionali: algoritmo di Sinkhorn, epsilon-scaling, trasporto non bilanciato, applicazioni all'apprendimento automatico.

Parti I–II: Teoria della Misura, Problema di Monge e Kantorovich

[K42] Kantorovich, L. V. (1942). On the translocation of masses. Doklady Akademii Nauk SSSR, vol. 37, pp. 199–201. — Articolo fondazionale in cui Kantorovich introduce il rilassamento del problema di Monge come programma lineare.

[K48] Kantorovich, L. V. (1948). On a problem of Monge. Uspekhi Matematicheskikh Nauk, vol. 3, no. 2, pp. 225–226.

[B87] Brenier, Y. (1987). Décomposition polaire et réarrangement monotone des champs de vecteurs. Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Paris, vol. 305, pp. 805–808.

[B91] Brenier, Y. (1991). Polar factorization and monotone rearrangement of vector-valued functions. Communications on Pure and Applied Mathematics, vol. 44, pp. 375–417. — Dimostrazione del teorema fondamentale sull'esistenza e unicità della mappa ottimale come gradiente convesso.

[Rok] Rokhlin, V. A. (1949). On the fundamental ideas of measure theory. AMS Translations, vol. 71, pp. 1–54. — Teorema di disintegrazione

delle misure, fondamento della teoria dei piani di trasporto condizionati.

[Prok] Prokhorov, Yu. V. (1956). Convergence of random processes and limit theorems in probability theory. Theory of Probability and Its Applications, vol. 1, pp. 157–214. — Criterio di compattezza per famiglie di misure di probabilità.

Parte II: Geometria degli Spazi di Wasserstein

[Mc97] McCann, R. J. (1997). A convexity principle for interacting gases. Advances in Mathematics, vol. 128, pp. 153–179. — Teoria delle geodetiche in $(\mathscr{P}_2(\mathbb{R}^n), W_2)$: interpolazione per spostamento, convessità di displacement, disuguaglianza di Brunn–Minkowski.

[BB00] Benamou, J.-D., Brenier, Y. (2000). A computational fluid mechanics solution to the Monge-Kantorovich mass transfer problem. Numerische Mathematik, vol. 84, pp. 375–393. — Formula di Benamou-Brenier: rappresentazione dinamica di W_2 come energia cinetica minimale.

[Ott01] Otto, F. (2001). The geometry of dissipative evolution equations: the porous medium equation. Communications in Partial Differential Equations, vol. 26, pp. 101–174. — Struttura riemanniana formale dello spazio di Wasserstein e connessione con le PDE paraboliche.

[KR58] Kantorovich, L. V., Rubinstein, G. Sh. (1958). On a space of completely additive functions. Vestnik Leningradskogo Universiteta, vol. 13, pp. 52–59. — Dualità di Kantorovich-Rubinstein per la distanza W_1.

Parte III: Equazione di Monge–Ampère e Teoria di Caffarelli

[Ale58] Aleksandrov, A. D. (1958). Die innere Geometrie der konvexen Flächen. Akademie-Verlag, Berlin. — Definizione della misura di Monge-Ampère e teoria delle soluzioni generalizzate (soluzioni di Aleksandrov).

[Caf90] Caffarelli, L. A. (1990). A localization property of viscosity solutions to the Monge-Ampère equation and their strict convexity. Annals of Mathematics, vol. 131, pp. 129–134. — Lemma delle sezioni e localizzazione della regolarità.

[Caf92] Caffarelli, L. A. (1992). The regularity of mappings with a convex potential. Journal of the American Mathematical Society, vol. 5, pp. 99–104. — Teorema C^{1,α} e C^{2,α} per la mappa di Brenier con dati hölderiani.

[CNS84] Caffarelli, L. A., Nirenberg, L., Spruck, J. (1984). The Dirichlet problem for nonlinear second order elliptic equations I. Monge-Ampère equations. Communications on Pure and Applied Mathematics, vol. 37, pp. 369–402. — Regolarità globale al bordo per l'equazione di Monge-Ampère.

[Yau78] Yau, S.-T. (1978). On the Ricci curvature of a compact Kähler manifold and the complex Monge-Ampère equation I. Communications on Pure and Applied Mathematics, vol. 31, pp. 339–411. — Soluzione del problema di Calabi e dimostrazione del teorema di Calabi-Yau.

Parte IV: Regolarizzazione Entropica e Applicazioni

[Sch32] Schrödinger, E. (1931/1932). Über die Umkehrung der Naturgesetze. Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften, vol. 144, pp. 144–153; (1932) vol. 144, pp. 412–428. — Formulazione originale del problema di inferenza per processi di diffusione.

[Sink64] Sinkhorn, R. (1964). A relationship between arbitrary positive matrices and doubly stochastic matrices. Annals of Mathematical Statistics, vol. 35, pp. 876–879. — Algoritmo di normalizzazione iterativa di matrici positive.

[Cut13] Cuturi, M. (2013). Sinkhorn distances: Lightspeed computation of optimal transport distances. Advances in Neural Information Processing Systems, vol. 26. — Riscoperta moderna dell'algoritmo di Sinkhorn per il trasporto ottimale entropico.

[JKO98] Jordan, R., Kinderlehrer, D., Otto, F. (1998). The variational formulation of the Fokker-Planck equation. SIAM Journal on Mathematical Analysis, vol. 29, pp. 1–17. — Schema JKO: interpretazione dell'equazione di Fokker-Planck come flusso gradiente in spazio di Wasserstein.

[OV00] Otto, F., Villani, C. (2000). Generalization of an inequality by Talagrand and links with the logarithmic Sobolev inequality. Journal of Functional Analysis, vol. 173, pp. 361–400. — Disuguaglianza di Talagrand, catena HWI e connessioni con le disuguaglianze di Sobolev logaritmiche.

Parti V–VI: PDE Ellittiche, Sinkhorn Avanzato e Modelli Generativi

[KS80] Krylov, N. V., Safonov, M. V. (1980). An estimate for the probability of a diffusion process hitting a set of positive measure. Soviet Mathematics Doklady, vol. 20, pp. 253–255. — Stima di Harnack per operatori pienamente nonlineari uniformemente ellittici.

[Gen19] Genevay, A., Chizat, L., Bach, F., Cuturi, M., Peyré, G. (2019). Sample complexity of Sinkhorn divergences. Proceedings of the 22nd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS), pp. 1574–1583. — Complessità campionaria per la divergenza di Sinkhorn.

[ACBCP21] Arjovsky, M., Chintala, S., Bottou, L. (2017). Wasserstein GAN. Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning (ICML), pp. 214–223. — Wasserstein GAN: sostituzione della divergenza di Jensen-Shannon con la distanza W_1.

[Liu22] Liu, X., Gong, C., Liu, Q. (2022). Flow Straight and Fast: Learning to Generate and Transfer Data with Rectified Flow. International Conference on Learning Representations (ICLR) 2023. ArXiv:2209.03003. — Rectified Flow: convergenza verso il trasporto ottimale tramite reflow iterativo.

[Lip22] Lipman, Y., Chen, R. T. Q., Ben-Hamu, H., Nickel, M., Le, M. (2022). Flow Matching for Generative Modeling. International Conference on Learning Representations (ICLR) 2023. ArXiv:2210.02747. — Flow Matching: addestramento di modelli generativi tramite interpolazione lineare tra distribuzioni.

[SE20] Song, Y., Ermon, S. (2019). Generative Modeling by Estimating Gradients of the Data Distribution. Advances in Neural

Information Processing Systems, vol. 32. — Score matching per modelli generativi basati su gradiente dell'entropia di Wasserstein.

[Kor21] Korotin, A., Egiazarian, V., Asadulaev, A., Safin, A., Burnaev, E. (2021). Wasserstein-2 Generative Networks. International Conference on Learning Representations (ICLR) 2021. ArXiv:1909.13082. — Trasporto ottimale neurale con reti convesse per la distanza W_2.

[CF17] Courty, N., Flamary, R., Tuia, D., Rakotomamonjy, A. (2017). Optimal Transport for Domain Adaptation. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, vol. 39, pp. 1853–1865. — Applicazione del trasporto ottimale all'adattamento di dominio nell'apprendimento automatico.

[Amos17] Amos, B., Xu, L., Kolter, J. Z. (2017). Input Convex Neural Networks. Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning (ICML), pp. 146–155. — Reti neurali Input-Convex (ICNN) per approssimare funzioni convesse e potenziali duali di Kantorovich.

[Sch19] Schmitzer, B. (2019). Stabilized Sparse Scaling Algorithms for Entropy Regularized Transport Problems. SIAM Journal on Scientific Computing, vol. 41, pp. A1443–A1481. — Epsilon-scaling e tecniche di stabilizzazione numerica per l'algoritmo di Sinkhorn.

PARTE VII

Baricentri di Wasserstein, Trasporto Multi-Marginale e Distanza di Gromov–Wasserstein

Capitolo 14 — Baricentri di Wasserstein e Trasporto Multi-Marginale

La nozione di media, o baricentro, è uno dei concetti più fondamentali della matematica applicata: dato un insieme di oggetti e un sistema di pesi, si cerca un elemento che li sintentizzi minimizzando un criterio di dispersione. Negli spazi euclidei questo porta alla media pesata classica; nello spazio di Wasserstein la stessa idea produce il baricentro di Wasserstein, introdotto da Agueh e Carlier nel 2011, che ha trovato applicazioni straordinarie nel trasferimento di colore, nell'apprendimento federato, nella stima bayesiana e nella computer vision. Il problema del baricentro di Wasserstein è intimamente legato al problema del trasporto multi-marginale di Kantorovich, una generalizzazione del problema classico in cui si cerca un piano di trasporto con più di due marginali prescritte. La teoria del trasporto multi-marginale, sviluppata principalmente da Gangbo e święch, Pass e collaboratori, presenta strutture di soluzione di notevole sottigliezza e trova applicazioni in economia matematica, teoria dei giochi a campo medio e meccanica quantistica.

14.1 Il Problema di Fréchet-Wasserstein

Siano μ_1, …, μ_K $\in$ ³₂($\mathbb{R}^n$) misure di probabilità con momenti secondi finiti, e siano λ_1, …, λ_K > 0 pesi con $\sum_i \lambda_i = 1$. Il baricentro di Wasserstein di μ_1, …, μ_K con pesi λ_1, …, λ_K è il problema di minimizzazione:

μ := argmin_{μ $\in$ ³₂($\mathbb{R}^n$)} $\sum$_{k=1}^K λ_k $W_2^2(\mu, \mu_k)$.*

Il funzionale $F(\mu) := \sum_k \lambda_k W_2^2(\mu, \mu_k)$ è una generalizzazione della varianza campionaria allo spazio di Wasserstein: la distanza W_2^2 sostituisce la distanza euclidea quadratica. Nella geometria riemanniana formale di Otto (Sezione 5.4), il baricentro di Wasserstein è il punto di Fréchet dello spazio $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n), W_2)$, esattamente come la media è il punto di Fréchet in uno spazio euclideo.

Un esempio illuminante si ottiene nel caso $K = 2$ con pesi uguali $\lambda_1 = \lambda_2 = 1/2$: il baricentro è la geodetica di McCann a $t = 1/2$, ossia la misura interpolante $\mu_{1/2}$ tra μ_1 e μ_2 (Capitolo 5). Per K > 2, il baricentro non ha in generale una forma chiusa in termini delle geodetiche a coppie, e richiede la minimizzazione del funzionale F su tutto $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$. Il caso gaussiano multi-marginale ha un'espressione chiusa: se $\mu_k = \mathcal{N}(m_k, \Sigma_k)$, il baricentro è $\mathcal{N}(m^*, \Sigma^*)$ dove $m^* = \sum_k \lambda_k m_k$ e Σ^* è la soluzione dell'equazione matriciale di Bures: $\Sigma^* = \sum_k \lambda_k (\Sigma^{*1/2} \Sigma_k \Sigma^{*1/2})^{1/2}$, che si risolve con iterazioni di punto fisso (metodo di Alvarez-Estabilier–Peyre).

14.2 Esistenza, Unicità e Caratterizzazione

Teorema 14.1 (Agueh–Carlier, 2011 — Esistenza del baricentro).

Siano $\mu_1, \dots, \mu_K \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ e $\lambda_1, \dots, \lambda_K$ > 0 con $\sum_k \lambda_k = 1$. Il problema di minimizzazione (14.1) ammette almeno un minimizzatore $\mu^* \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$. Se almeno una delle misure μ_k è assolutamente continua rispetto a $\mathcal{L}^n$, il minimizzatore è unico.

Dimostrazione. L'esistenza segue dalla semicontinuità inferiore di W_2^2 nella convergenza stretta (Teorema 4.1) e dalla coercività del

funzionale F: se $\mu_n \rightharpoonup \mu$, allora $F(\mu) \leq \liminf F(\mu_n)$ per il Lemma di Fatou. La coercività si verifica notando che $F(\mu) \geq \lambda_1 W_2^2(\mu, \mu_1)$ e che le successioni con $F(\mu_n)$ limitato sono equistrettate (per il Teorema di Prokhorov). Per l'unicità: se $\mu_{k_0} \ll \mathcal{L}^n$, il funzionale F è strettamente convesso lungo le geodetiche di McCann. Questa proprietà si deduce dalla convessità displacement di $W_2^2(\cdot, \mu_k)$ (che segue da W_2^2 essendo un funzionale di interazione lineare in μ, convex displacement per costruzione del cammino geodetico). La stretta convessità del funzionale su $\mathcal{P}_2$ implica l'unicità del minimo. □

Il baricentro di Wasserstein ammette una caratterizzazione tramite la struttura del piano di trasporto multi-marginale ottimale, un collegamento che Agueh e Carlier stabilirono sfruttando la dualità di Kantorovich generalizzata. Un piano multi-marginale per le misure $\mu_1, \ldots, \mu_K$ è una misura $\gamma \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^{nK})$ con marginali $((\pi_k)_\star\gamma)_{1\leq k\leq K} = (\mu_1, \ldots, \mu_K)$. Il costo multi-marginale associato al problema del baricentro è:

$$c(x_1, \ldots, x_K) := \min_{y \in \mathbb{R}^n} \sum_{k=1}^K \lambda_k |x_k - y|^2 = \sum_{k=1}^K \lambda_k |x_k - \sum_j \lambda_j x_j|^2.$$

Il minimo in y del costo multi-marginale è la media pesata $y^* = \sum_k \lambda_k x_k$, e il valore minimo è la varianza pesata dei punti $x_1, \ldots, x_K$ rispetto alla loro media. Il problema di Kantorovich multi-marginale si scrive:

$$MK(\mu_1, \ldots, \mu_K) := \inf_{\gamma \in \Pi(\mu_1,\ldots,\mu_K)} \int c(x_1, \ldots, x_K)\, d\gamma(x_1, \ldots, x_K),$$

dove $\Pi(\mu_1, \ldots, \mu_K)$ è l'insieme dei piani multi-marginali. Il collegamento fondamentale tra baricentro e trasporto multi-marginale è il seguente: il baricentro $\mu*$ è l'immagine tramite la mappa $Y(x_1, \ldots, x_K) = \sum_k \lambda_k x_k$ del piano multi-marginale ottimale, e $MK(\mu_1, \ldots, \mu_K) = F(\mu*) = \min_\mu F(\mu)$. Questa equivalenza riduce il calcolo del baricentro al problema del trasporto multi-marginale ottimale.

14.3 Il Problema Multi-Marginale di Kantorovich

Il problema del trasporto ottimale multi-marginale generalizza il caso bimarginale $K = 2$ in modo non banale: la struttura delle soluzioni ottimali cambia qualitativamente al crescere di K e dipende in modo essenziale dalla struttura del costo multi-marginale c. Per il costo bimarginale $c(x, y) = |x - y|^2$, la soluzione ottimale è deterministica (supportata sul grafico di una mappa, il teorema di Brenier). Per costi multi-marginali generali, la struttura ottimale può essere stocastica (non concentrata su un grafico).

Teorema 14.2 (Gangbo–święch, 1998 — Struttura delle soluzioni multi-marginali).

Sia $c(x_1, \ldots, x_K) = \sum_{k<l} h(x_k, x_l)$ con $h(x, y) = -|x - y|^2/(K(K-1))$ (costo di tipo repulsivo). Se $\mu_1, \ldots, \mu_K \ll \mathcal{L}^n$, allora il problema multi-marginale ammette un'unica soluzione, ed essa è supportata sul grafico di una mappa deterministica: esistono funzioni $T_2, \ldots, T_K$ con $(T_k)_\star\mu_1 = \mu_k$ tali che $\gamma* = (id, T_2, \ldots, T_K)_\star\mu_1$.

Dimostrazione (schema). La struttura deterministica si dimostra tramite la c-monotonia ciclica multi-marginale: il supporto di $\gamma*$ è

un insieme c-ciclicamente monotono nel senso multi-dimensionale. Per il costo h di tipo repulsivo, la c-monotonia ciclica forza il supporto a stare su un grafico, analogamente al costo quadratico bimarginale. L'argomento si basa sulla differenziabilità del costo rispetto a ciascun marginale e sull'applicazione iterata del teorema di Brenier condizionato. □

Un caso di interesse opposto, il costo repulsivo — fondamentale in meccanica quantistica per il problema di correlazione di Lieb–Oxford — è il costo di Coulomb $c(x_1, \ldots, x_K) = \sum_{k<l} |x_k - x_l|^{-1}$. Per questo costo, la soluzione ottimale multi-marginale corrisponde al gas di elettroni con correlazione minima, un problema aperto di grande importanza in teoria del funzionale della densità (DFT). Cotar, Friesecke e Klüppelberg (2013) hanno dimostrato che nel limite di densità elevata il piano ottimale Coulombiano converge al trasporto ottimale classico, stabilendo un collegamento tra DFT e trasporto ottimale di estremo interesse fisico.

14.4 Algoritmo di Sinkhorn Multi-Marginale e Applicazioni

Il problema di trasporto ottimale multi-marginale con regolarizzazione entropica si generalizza in modo diretto: dato il nucleo di Gibbs multi-marginale $K(x_1, \ldots, x_K) = \exp(-c(x_1, \ldots, x_K)/\varepsilon)$, il piano ottimale regolarizzato ha la forma

$$d\gamma_\varepsilon(x_1, \ldots, x_K) = u_1(x_1) \cdot \ldots \cdot u_K(x_K) \cdot K(x_1, \ldots, x_K) \cdot d(\mu_1 \otimes \ldots \otimes \mu_K),$$

dove le funzioni u_1, …, u_K soddisfano K sistemi accoppiati di equazioni di Schrödinger multi-marginali. L'algoritmo di Sinkhorn multi-marginale alterna le K proiezioni I-divergenziali: per k = 1, …, K a rotazione, si aggiorna u_k tramite la normalizzazione della marginale k-esima di γ_ε. Per K misure con N punti di supporto ciascuna, la complessità per iterazione è $O(N^K d)$, scalabile tramite strutture tensoriali sparse e algoritmi di decomposizione gerarchica.

L'applicazione più diretta del baricentro di Wasserstein è il trasferimento di colore (colour transfer): date K immagini μ_1, …, μ_K viste come distribuzioni di colore in $\mathbb{R}^3$, il baricentro μ^* con pesi uniformi $\lambda_k = 1/K$ è un'immagine sintetica che media i colori delle K immagini sorgenti in modo geometricamente ottimale. Rispetto alla media aritmetica dei colori (che produce colori spenti e non realistici), il baricentro di Wasserstein preserva la vivacità e la struttura spettrale delle immagini originali. In apprendimento federato, i parametri dei modelli neurali su K client con distribuzioni di dati eterogenee si aggregano tramite il baricentro di Wasserstein dello spazio dei parametri, un approccio che migliora la convergenza rispetto alla media FedAvg classica in presenza di class imbalance (Lin et al., 2020).

Capitolo 15 — La Distanza di Gromov–Wasserstein

Il trasporto ottimale classico — nella formulazione di Monge, Kantorovich e Wasserstein — confronta due misure di probabilità definite sullo stesso spazio metrico di sfondo. In molte applicazioni, tuttavia, si vogliono

confrontare distribuzioni definite su spazi diversi, o persino su spazi metrici non incorporati in uno spazio comune: il confronto di grafi di reti biologiche, di forme tridimensionali di proteine, di mappe di città o di strutture sintattiche in linguaggi naturali. La distanza di Gromov–Wasserstein (GW), introdotta da Mémoli nel 2011 e sviluppata da Sturm nella formulazione L2, risolve questo problema confrontando la struttura interna degli spazi (le distanze tra punti) piuttosto che la posizione assoluta. Essa si pone come una versione misurabile e computabile della distanza di Gromov–Hausdorff tra spazi metrici compatti, con il vantaggio decisivo di ammettere una teoria duale e un algoritmo computazionale (Sinkhorn per GW).

15.1 Spazi Metrici Misurati e la Distanza di Gromov–Hausdorff

Uno spazio metrico misurato (mm-spazio) è una tripla (X, d_X, μ_X) dove (X, d_X) è uno spazio metrico compatto e $\mu_X \in {}^{\circ}(X)$ è una misura di probabilità di pieno supporto. Il confronto isometrico tra due mm-spazi (X, d_X, μ_X) e (Y, d_Y, μ_Y) si intende nel senso più debole possibile: si dice che X e Y sono isomorfi come mm-spazi se esiste una mappa misurabíle e bimisurabile $\Phi : X \to Y$ che preserva le distanze μ_X-quasi ovunque ($\Phi_\bigstar \mu_X = \mu_Y$) e tale che $d_X(x, x') = d_Y(\Phi(x), \Phi(x'))$ per $\mu_X \otimes \mu_X$-quasi ogni coppia (x, x'). Questa nozione di isomorfismo è strettamente più debole dell'isometria classica: si richiedono solo le distanze μ_X-quasi ovunque, non su tutti i punti.

La distanza di Gromov–Hausdorff tra due spazi metrici compatti (X, d_X) e (Y, d_Y) è:

$$d_{GH}(X, Y) := (1/2) \inf_{Z, \Phi_X, \Phi_Y} d_H^Z(\Phi_X(X), \Phi_Y(Y)),$$

dove l'infimo è preso su tutti gli spazi metrici Z e su tutte le isometrie $\Phi_X : X \to Z$, $\Phi_Y : Y \to Z$. La distanza d_{GH} definisce una metrica sull'insieme degli spazi metrici compatti a meno di isometria, con le proprietà di completezza e separabilità (teorema di Gromov). Tuttavia, d_{GH} non è computazionalmente accessibile: il calcolo del minimo sull'insieme di tutti gli spazi Z è un problema NP-arduo anche per grafi finiti. La distanza di Gromov–Wasserstein risolve questo problema incorporando la struttura probabilistica di μ_X e μ_Y.

15.2 Definizione della Distanza di Gromov–Wasserstein

Siano (X, d_X, μ_X) e (Y, d_Y, μ_Y) due mm-spazi. Per ogni piano di accoppiamento $\gamma \in \Pi(\mu_X, \mu_Y)$, si definisce il costo strutturale di γ come la discrepanza tra le strutture di distanza interne di X e Y nella metrica $L^2(\gamma \otimes \gamma)$:

$$GW_\gamma := \iint |d_X(x, x') - d_Y(y, y')|^2 \, d\gamma(x, y) \, d\gamma(x', y').$$

La distanza di Gromov–Wasserstein di ordine 2 tra gli mm-spazi X e Y è:

$$GW_2(X, Y) := (1/2) \cdot \inf_{\gamma \in \Pi(\mu_X, \mu_Y)} GW_\gamma.$$

La quantità GW_2 ha un'interpretazione intuitiva: si cerca il piano di trasporto γ tra μ_X e μ_Y che accoppi i punti di X ai punti di Y in modo

che le distanze reciproche siano preservate il più possibile. Il piano γ non richiede che X e Y siano immersi in uno spazio comune: la discrepanza è misurata internamente, confrontando $d_X(x, x')$ e $d_Y(y, y')$ per le coppie accoppiate. Questa propertà rende GW applicabile a oggetti definiti su spazi radicalmente diversi (ad esempio, un grafo proteico e una curva planare).

Teorema 15.1 (Mémoli, 2011 — Proprietà metriche di GW_2).

La funzione GW_2 definisce una pseudo-metrica sull'insieme degli mm-spazi: (i) $GW_2(X, Y) \geq 0$ con uguaglianza se e solo se X e Y sono isomorfi come mm-spazi; (ii) $GW_2(X, Y) = GW_2(Y, X)$; (iii) $GW_2(X, Z) \leq GW_2(X, Y) + GW_2(Y, Z)$ (disuguaglianza triangolare). Inoltre, $GW_2 \leq d_{GH}$, ossia la distanza di Gromov–Wasserstein è più fine della distanza di Gromov–Hausdorff.

Dimostrazione. La simmetria è immediata per simmetria del costo. Per la separazione: $GW_2(X, Y) = 0$ significa che esiste $\gamma \in \Pi(\mu_X, \mu_Y)$ con $GW_\gamma = 0$, cioè $d_X(x, x') = d_Y(y, y')$ per $\gamma \otimes \gamma$-quasi ogni coppia. Usando la disintegrazione di Rokhlin, si costruisce una mappa misurabíle $\Phi : X \to Y$ che realizza l'isomorfismo q.o. La disuguaglianza triangolare richiede un argomento di incollaggio (gluing): dati $\gamma_{XY} \in \Pi(\mu_X, \mu_Y)$ e $\gamma_{YZ} \in \Pi(\mu_Y, \mu_Z)$, il piano incollato $\gamma_{XYZ} \in \Pi(\mu_X, \mu_Y, \mu_Z)$ (Lemma 1.3) e la sua proiezione su $X \times Z$ è un piano ammissibile per $GW_2(X, Z)$. La stima del costo strutturale del piano incollato si ottiene dall'identità $(a-b)^2 \leq 2(a-c)^2 + 2(c-b)^2$ applicata con $a=d_X$, $b=d_Z$, $c=d_Y$ e l'integrazione rispetto a γ_{XYZ}. □

15.3 Struttura Duale e Condizioni di Ottimalità

Il problema di Gromov–Wasserstein ammette una teoria duale, sebbene più complessa di quella del trasporto ottimale classico, a causa della non linearità del funzionale GW_γ nel piano γ. Il problema GW_2 può essere riscritto come un problema di ottimizzazione quadratica (QP) sul poliedro $\Pi(\mu_X, \mu_Y)$: si tratta di minimizzare un funzionale quadratico convesso in γ su un insieme convesso compatto. La forma quadratica associata ha la struttura:

$$GW_\gamma = \| d_X \|^2_{L^2(\mu_X \otimes \mu_X)} + \| d_Y \|^2_{L^2(\mu_Y \otimes \mu_Y)} - 2 \iint d_X(x,x')\, d_Y(y,y')\, d\gamma(x,y) d\gamma(x',y').$$

I termini $\| d_X \|^2$ e $\| d_Y \|^2$ sono costanti rispetto a γ, dunque minimizzare GW_γ equivale a massimizzare il termine di accoppiamento incrociato $\iint d_X(x,x')\, d_Y(y,y')\, d\gamma(x,y)\, d\gamma(x',y')$. Questa è una forma quadratica in γ, il che rende il problema GW non convesso in generale (la massimizzazione di una forma quadratica su un poliedro è NP-ardua nel caso discreto). Tuttavia, esistono algoritmi praticamente efficaci basati sul metodo del gradiente proiettato alternato (FW-GW di Peyré et al., 2016): ad ogni iterazione si linearizza il funzionale GW in γ, producendo un problema di trasporto ottimale lineare risolvibile con Sinkhorn, e si esegue un passo di tipo Frank-Wolfe. L'algoritmo converge a un punto critico locale del problema GW, e in pratica trova soluzioni di qualità elevata.

Proposizione 15.1 (Condizioni di ottimalità per GW).

Un piano $\gamma^* \in \Pi(\mu_X, \mu_Y)$ è un minimo locale del funzionale GW_γ se e solo se γ^* è un piano di trasporto ottimale per il costo linearizzato

$c_{\gamma*}(x, y) := - \int [d_X(x, x') d_Y(y, y')] d\gamma*(x', y')$. In altri termini: $\gamma* = argmin_{\gamma \in \Pi(\mu_X,\mu_Y)} \int c_{\gamma*}(x,y) d\gamma(x,y)$.

Dimostrazione. La condizione di stazionarità del funzionale quadratico GW_γ nel piano $\gamma*$ afferma che il gradiente di GW rispetto a γ, calcolato in $\gamma*$, deve essere non negativo sul cono tangente ammissibile a $\Pi(\mu_X, \mu_Y)$ in $\gamma*$. La derivata di GW_γ nella direzione $\gamma' - \gamma$ (con $\gamma' \in \Pi(\mu_X, \mu_Y)$) è $2 \int c_{\gamma}(x,y) d(\gamma' - \gamma)(x,y)$. La condizione di stazionarità richiede che $\int c_{\gamma*} d\gamma \geq \int c_{\gamma*} d\gamma*$ per ogni γ' ammissibile, che è esattamente la condizione di ottimalità per il trasporto lineare con costo $c_{\gamma*}$. □

15.4 Regolarizzazione Entropica di Gromov–Wasserstein

Analogamente al caso del trasporto ottimale classico, si può regolarizzare il problema GW con un termine entropico:

$GW_\varepsilon(X, Y) := (1/2) \inf_{\gamma \in \Pi(\mu_X,\mu_Y)} \{ GW_\gamma + \varepsilon \cdot KL(\gamma \,//\, \mu_X \otimes \mu_Y) \}$.

Per ε > 0, il funzionale regolarizzato è strettamente convesso in γ (la somma di una funzione quadratica e di KL), il che garantisce unicità del minimizzatore γ_ε. L'algoritmo di Sinkhorn per GW si ottiene alternando i seguenti due passi:

(1) Linearizzare: calcolare $c_{\gamma^n}(x,y) = - \int d_X(x,x') d_Y(y,y') d\gamma^n(x',y')$.

(2) Sinkhorn: $\gamma^{n+1} = argmin_{\gamma} \{ \int c_{\gamma^n} d\gamma + \varepsilon KL(\gamma \,//\, \mu_X \otimes \mu_Y) \}$.

Il passo (2) è un problema di trasporto ottimale entropico classico con costo c_{γ^n}, risolvibile con l'algoritmo di Sinkhorn del Capitolo 7. L'algoritmo Sinkhorn-GW converge a un punto fisso che soddisfa la condizione di ottimalità della Proposizione 15.1, con regolarizzazione entropica. Per le applicazioni computazionali, la complessità per iterazione è $O(N^2)$ per grafi con N nodi, contro $O(N^3)$ per i metodi basati sul simplesso. Peyré, Cuturi e Solomon (2016) hanno introdotto questa formulazione e dimostrato la convergenza empirica su una vasta gamma di applicazioni.

15.5 Applicazioni: Confronto di Grafi e Allineamento di Dati

La distanza di Gromov–Wasserstein ha trovato applicazioni in bioinformatica (confronto di reti di proteine e trascrittomiche), computer graphics (shape matching di superfici 3D), e apprendimento di rappresentazioni (allineamento di spazi di embedding in lingue diverse). In ciascuno di questi contesti, il punto di forza di GW rispetto ai metodi alternativi è la capacità di confrontare strutture su spazi di dimensioni o topologie radicalmente diverse, preservando la struttura interna delle relazioni tra elementi.

Un caso particolarmente studiato è il confronto di grafi: si modella un grafo $G = (V, E)$ come un mm-spazio (V, d_G, μ_G), dove d_G è la distanza del cammino minimo e μ_G la distribuzione uniforme sui nodi. Due grafi G e H sono confrontati tramite $GW_2((V_G, d_G, \mu_G), (V_H, d_H, \mu_H))$, che misura quanto le strutture di distanza interna

differiscono dopo il miglior accoppiamento nodo-nodo. Il piano ottimale γ^* è interpretabile come un matching soft tra nodi di G e nodi di H, che può essere inviato a un matching hard assegnando ogni nodo di G al nodo più pesante in H (il nodo con massima massa marginale in γ^*).

Nel contesto dell'elaborazione del linguaggio naturale, le word embeddings di lingue diverse (ad esempio italiano e cinese) vivono in spazi vettoriali diversi. Allineare questi spazi tramite GW produce una corrispondenza lessicale cross-linguistica senza dizionari paralleli: il trasporto ottimale di Gromov–Wasserstein accoppia le parole di una lingua alle parole dell'altra preservando le relazioni di similarità semantica (Alvarez-Melis e Jaakkola, 2018). Questa applicazione, denominata allineamento di spazi di embedding, ha dimostrato performance comparabili a metodi supervisionati su benchmark di traduzione automatica non supervisionata.

Infine, la variante fused di Gromov–Wasserstein (FGW) di Vayer et al. (2019) combina il trasporto ottimale classico W_2 e la distanza GW_2 in un funzionale ibrido:

$$FGW_\alpha(X, Y) := (1 - \alpha)\, W_2^2(X, Y) + \alpha \cdot GW_2(X, Y),$$

dove $\alpha \in [0, 1]$ bilancia il confronto delle posizioni assolute (W_2, adatto quando gli spazi hanno una struttura comune) e del confronto delle strutture interne (GW_2, adatto quando le strutture sono omologhe ma vivono in spazi diversi). FGW è la distanza naturale tra grafi con attributi sui nodi, dove W_2 confronta gli attributi e GW_2 confronta le adiacenze: essa ha trovato applicazione nella classificazione di grafi di molecole per la scoperta di farmaci.

Integrazioni Bibliografiche per la Parte VII

[AC11] Agueh, M., Carlier, G. (2011). Barycenters in the Wasserstein space. SIAM Journal on Mathematical Analysis, vol. 43, pp. 904–924. — Baricentri di Wasserstein: esistenza, unicità e caratterizzazione tramite il trasporto multi-marginale.

[GS98] Gangbo, W., święch, A. (1998). Optimal maps for the multidimensional Monge–Kantorovich problem. Communications on Pure and Applied Mathematics, vol. 51, pp. 23–45. — Struttura deterministica delle soluzioni del problema di trasporto multi-marginale per costi repulsivi.

[Pass15] Pass, B. (2015). Multi-marginal optimal transport: theory and applications. ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol. 49, pp. 1771–1790. — Rassegna del trasporto multi-marginale con applicazioni alla meccanica quantistica e all'economia.

[Mem11] Mémoli, F. (2011). Gromov–Wasserstein distances and the metric approach to object matching. Foundations of Computational Mathematics, vol. 11, pp. 417–487. — Definizione e proprietà della distanza di Gromov–Wasserstein, relazione con la distanza di Gromov–Hausdorff.

[PCvdM16] Peyré, G., Cuturi, M., Solomon, J. (2016). Gromov–Wasserstein averaging of kernel and distance matrices. Proceedings of the 33rd International Conference on Machine Learning (ICML), pp. 2664–2672. — Algoritmo di Sinkhorn per GW regolarizzato entropicamente; baricentri di Gromov–Wasserstein.

[AMJ18] Alvarez-Melis, D., Jaakkola, T. S. (2018). Gromov–Wasserstein alignment of word embedding spaces. Proceedings of the 2018 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing (EMNLP). — Allineamento di spazi di embedding cross-linguistici tramite GW.

[Vay+19] Vayer, T., Chapel, L., Flamary, R., Tavenard, R., Courty, N. (2019). Fused Gromov–Wasserstein distance for structured objects. Algorithms, vol. 13, no. 9, p. 212. — Distanza Fused GW per grafi con attributi; applicazioni alla classificazione di grafi molecolari.

PARTE VIII

Curvatura negli Spazi di Wasserstein e Statistiche del Trasporto Ottimale

Capitolo 16 — Curvatura e Sintesi di Ricci: la Teoria di Lott–Villani–Sturm

Uno dei contributi più profondi del trasporto ottimale alla geometria è la teoria sintetica della curvatura di Ricci in spazi metrici misurati, sviluppata indipendentemente da Lott e Villani da un lato e da Sturm dall'altro tra il 2005 e il 2009. Questa teoria risponde a una domanda fondamentale: come si può definire la curvatura di Ricci in un ambiente in cui non esiste una struttura differenziale — ad esempio su un poliedro, su uno spazio di Alexandrov, o su un limite di varietà riemanniane? La risposta di Lott–Villani–Sturm (LVS) è elegante e sorprendente: la curvatura di Ricci di uno spazio metrico misurato (X, d, m) è limitata inferiormente da $K \in \mathbb{R}$ se e soltanto se certi funzionali di entropia sono K-convex displacement nello spazio di Wasserstein ($\mathcal{P}_2(X)$, W_2). Questa caratterizzazione è compatibile con quella riemanniana classica: per una varietà riemanniana (M, g), la condizione $\mathrm{Ric} \geq K\, g$ equivale esattamente alla K-convessità displacement dell'entropia di Boltzmann rispetto alla misura di volume. La portata di questa equivalenza è enorme: permette di trasportare le disuguaglianze funzionali (logaritmiche di Sobolev, di Poincaré, di isoperimetria) dal caso riemanniano al contesto sintetico, via una teoria basata esclusivamente su distanze e misure.

16.1 La Curvatura di Ricci Classica e i suoi Effetti Globali

Sia (M, g) una varietà riemanniana completa di dimensione n. Il tensore di Ricci Ric(v, v) misura, per ogni direzione tangente v con |v| =

1, la deviazione media del volume geodetico rispetto al volume euclideo: se si considera un cono geodetico di apertura ε nella direzione v, il suo volume a tempo t soddisfa

$$Vol(\text{cono geodet. di raggio } t, \text{ dir. } v) = \omega_n t^n \cdot [1 - Ric(v,v)\, t^2/(6(n+2)) + O(t')],$$

dove ω_n è il volume della palla unitaria euclidea n-dimensionale. La condizione $Ric \geq K\, g$ (curvatura di Ricci minorata da K in tutte le direzioni) afferma che il volume si espande meno rapidamente di quanto farebbe in uno spazio di curvatura K, e implica una serie di conseguenze analitiche e geometriche fondamentali: il teorema di Bishop–Gromov (controllo della crescita del volume delle palle geodetiche), la disuguaglianza di Poincaré (con costante dipendente da K e dal diametro), la disuguaglianza logaritmica di Sobolev (con costante K), la concentrazione gaussiana della misura (lemma di Lévy–Gromov), e la convergenza esponenziale dell'equazione del calore verso lo stato stazionario.

Il lavoro classico di Bakry e Émery (1985) aveva già individuato un criterio analitico equivalente alla condizione $Ric \geq K$: il criterio $\Gamma_2 \geq K\Gamma_1$ per l'operatore di diffusione L associato alla varietà. Questa formulazione, basata sugli operatori carré du champ, aveva permesso di estendere le disuguaglianze funzionali a spazi di diffusione astratti. La teoria LVS va oltre: invece di usare l'operatore differenziale, usa la struttura metrica e la convessità displacement nell'ambito di Wasserstein, e è quindi applicabile anche in assenza di strutture differenziali di fondo.

16.2 La Condizione CD(K, N): Curvatura–Dimensione Sintetica

La nozione centrale della teoria LVS è la condizione CD(K, N) (Curvature-Dimension), che codifica simultaneamente un lower bound sulla curvatura di Ricci (parametro $K \in \mathbb{R}$) e un upper bound sulla dimensione effettiva dello spazio (parametro $N \in [1, +\infty]$). Per definire la condizione CD(K, N) si introduce, per ogni $N' \in [1, +\infty]$, il funzionale di entropia di Rényi-Boltzmann di ordine N':

$$U_{N'}(\mu \mid m) := -\int_X \rho(x)^{1-1/N'}\, dm(x) \quad \text{se } \mu = \rho \cdot m + \mu_s,$$

dove μ_s è la parte singolare di μ rispetto a m. Per $N' \to +\infty$, $U_{N'}(\mu \mid m)$ converge all'entropia di Boltzmann $H(\mu \mid m) = \int \varrho \log \varrho \, dm$. Per $N' = n$ (la dimensione di una varietà), U_n misura la dispersione della densità con un esponente $(1 - 1/n)$ che riflette la dimensione.

Definizione 16.1 (Condizione CD(K, N) di Sturm–Lott–Villani).

Uno spazio metrico misurato (X, d, m) soddisfa la condizione CD(K, N) per $K \in \mathbb{R}$ e $N \in [1, +\infty)$ se per ogni coppia di misure $\mu_0, \mu_1 \in \mathcal{P}_2(X)$ con supporto in spt(m) esiste una geodetica $(\mu_t)_{t \in [0,1]}$ in $(\mathcal{P}_2(X), W_2)$ con μ_0 e μ_1 come estremi tale che, per ogni $N' \geq N$ e ogni $t \in [0,1]$:

$$U_{N'}(\mu_t \mid m) \leq -\iint [\tau_{K,N'}^{(1-t)}(d(x,y))\ \rho_0(x)^{-1/N'} + \tau_{K,N'}^{(t)}(d(x,y))\ \rho_1(y)^{-1/N'}]\, d\gamma^*(x,y),$$

dove γ^* è il piano di trasporto ottimale da μ_0 a μ_1 e i coefficienti di distorsione $\tau_{K,N'}^{(t)}(\theta)$ riflettono la geometria di uno spazio modello di curvatura K e dimensione N' (spazio di confronto di Sturm). Per $K = 0$, $\tau_{0,N'}^{(t)}(\theta) = t$ e si recupera la convessità displacement classica di McCann.

I coefficienti di distorsione $\tau_{K,N}^{(t)}(\theta)$ sono definiti tramite le funzioni di distorsione del volume geodetico degli spazi modello: sfera di raggio (N-1)/K per K > 0, spazio euclideo per K = 0, spazio iperbolico di curvatura K per K < 0. Esplicitamente:

$$\tau_{K,N}^{(t)}(\theta) = t^{1/N} \cdot [\sin(t\theta\sqrt{K/(N-1)}) / \sin(\theta\sqrt{K/(N-1)})]^{(N-1)/N} \quad (K > 0),$$

$$\tau_{K,N}^{(t)}(\theta) = t^{1/N} \cdot [\sinh(t\theta\sqrt{-K/(N-1)}) / \sinh(\theta\sqrt{-K/(N-1)})]^{(N-1)/N} \quad (K < 0).$$

La condizione CD(K, N) è compatibile con il caso riemanniano nel senso seguente: una varietà riemanniana completa (M, g) con misura di volume riemanniana $m = \mathrm{Vol}_g$ soddisfa CD(K, N) con N = dim M se e soltanto se $\mathrm{Ric}_g \geq K g$. Questa equivalenza, dimostrata da Sturm (2006) e Lott–Villani (2009), è il risultato fondazionale della teoria. Essa giustifica l'interpretazione di CD(K, N) come la versione sintetica di Ric ≥ K g e dim ≤ N.

Teorema 16.1 (Compatibilità con il caso riemanniano, Sturm 2006).

Sia (M, g) una varietà riemanniana completa di dimensione n e sia $m = \mathrm{Vol}_g$ la misura di volume riemanniana. Allora (M, d_g, m) soddisfa CD(K, n) per qualche $K \in \mathbb{R}$ se e soltanto se $\mathrm{Ric}_g(v, v) \geq K |v|_g^2$ per ogni campo vettoriale v su M. Inoltre, se (M, g) soddisfa CD(K, N) con N > n, allora $\mathrm{Ric}_g \geq K g$ (con costante eventualmente diversa, determinata da N, K e n).

Dimostrazione (schema). La direzione Ric ≥ K g ⇒ CD(K, n) si ottiene calcolando la variazione seconda di U_n lungo le geodetiche

di McCann. Si usa la formula di Jacobi per il determinante del flusso geodetico (determinante del Jacobiano della mappa esponenziale), che per una varietà con $\mathrm{Ric} \geq K\, g$ soddisfa la disuguaglianza di distorsione con i coefficienti $\tau_{K,n}^{(t)}$. La direzione inversa usa il fatto che la CD(K, n) al secondo ordine in $\theta \to 0$ implica la disuguaglianza di Ricci in tutti i punti: la condizione di convessità displacement a piccole scale si riduce alla curvatura di Ricci tramite sviluppo di Taylor del flusso geodetico. □

16.3 Stabilità per Convergenza di Gromov–Hausdorff e Applicazioni

Una delle proprietà più sorprendenti e utili della condizione CD(K, N) è la sua stabilità per la convergenza misurata di Gromov–Hausdorff: se una successione di spazi metrici misurati (X_n, d_n, m_n) soddisfa tutti CD(K, N) e converge a $(X_\infty, d_\infty, m_\infty)$ nel senso di Gromov–Hausdorff misurato, allora il limite $(X_\infty, d_\infty, m_\infty)$ soddisfa ancora CD(K, N). Questa proprietà di chiusura è fondamentale per la teoria dei limiti di varietà riemanniane: spazi limite di successioni di varietà con $\mathrm{Ric} \geq K$ (come i coni tangenti, le strutture di blow-up) soddisfano automaticamente CD(K, N), il che permette di applicare le disuguaglianze funzionali anche ai limiti singolari.

Teorema 16.2 (Stabilità per limiti GH, Lott–Villani 2009, Sturm 2006).

Sia (X_n, d_n, m_n) una successione di spazi metrici misurati soddisfacenti CD(K, N). Se $(X_n, d_n, m_n) \to (X, d, m)$ nel senso della convergenza di Gromov–Hausdorff misurata (convergenza di GW_2 in

senso adeguato), allora (X, d, m) soddisfa CD(K, N). In particolare, la classe CD(K, N) è chiusa per i limiti.

Dimostrazione. La condizione CD(K, N) può essere riformulata in termini di disuguaglianze integrali per coppie di misure in $\mathcal{P}_2(X)$: essa afferma che una certa funzione di $t \to U_{N'}(\mu_t \mid m_t)$ è minorata da una combinazione convessa di $U_{N'}(\mu_0 \mid m_0)$ e $U_{N'}(\mu_1 \mid m_1)$ con coefficienti dati dai coefficienti di distorsione. Questa condizione è della forma 'per ogni coppia di misure, esiste una geodetica che soddisfa la disuguaglianza', e si trasmette al limite per semicontinuità inferiore del funzionale di entropia e per la compattezza delle geodetiche (in spazi compatti CD(K, N), le geodetiche in $\mathcal{P}_2$ sono relativamente compatte nella topologia della convergenza puntuale). □

La teoria CD(K, N) ha trovato applicazioni decisive in tre ambiti. In primo luogo, essa permette di dimostrare la disuguaglianza di Brunn–Minkowski in forma funzionale per spazi con curvatura sintetica minorata, estendendo la disuguaglianza classica (à la McCann) ben oltre il contesto euclideo. In secondo luogo, la condizione CD(0, N) implica la disuguaglianza isoperimetrica di Lévy–Gromov per gli spazi metrici misurati: tra tutti gli insiemi di misura fissata, i sottoinsiemi geodesicamente convessi minimizzano la misura del bordo. In terzo luogo, CD(K, ∞) implica la disuguaglianza di Talagrand $W_2^2(\mu, m) \leq (2/K)\, H(\mu \mid m)$ per ogni misura μ (si veda il Capitolo 9), che è ora valida in qualsiasi spazio metrico misurato soddisfacente CD(K, ∞), non solo nelle varietà riemanniane.

16.4 La Condizione RCD(K, N): Curvatura Sintetica con Laplaciano

La condizione CD(K, N) ha una limitazione: non esclude i cosiddetti spazi di Finsler (spazi metrici localmente modelati su spazi normati non euclidei), per i quali la condizione CD(K, N) può essere soddisfatta anche in assenza di una struttura riemanniana di fondo. Per escludere questa anomalia e ottenere una teoria conforme agli spazi riemanniani, Ambrosio, Gigli e Savaré (2011–2014) hanno introdotto la condizione RCD(K, N) (Riemannian Curvature-Dimension), che aggiunge alla condizione CD(K, N) il requisito che lo spazio 'si comporti localmente come uno spazio riemanniano' nel senso della teoria di Sobolev.

Lo spazio di Sobolev $W^{1,2}(X, m)$ di uno spazio metrico misurato (X, d, m) si definisce come la chiusura delle funzioni Lipschitz rispetto alla norma $\|f\|_{W^{1,2}} = (\|f\|_{L^2(m)}^2 + \||Df|\|_{L^2(m)}^2)^{1/2}$, dove $|Df|(x) = \lim_{r\to 0} \sup_{d(y,x)\le r} |f(y)-f(x)|/r$ è la derivata di pendenza superiore. Lo spazio $W^{1,2}(X, m)$ è in generale uno spazio di Banach (non di Hilbert). La condizione RCD(K, N) richiede che $W^{1,2}(X, m)$ sia uno spazio di Hilbert (cioè la forma energia sia una forma quadratica), il che corrisponde all'isotropia locale dello spazio. Questa condizione, combinata con CD(K, N), seleziona esattamente la classe degli spazi 'riemanniani sintetici', che include le varietà riemanniane, i coni sulle varietà, i limiti di Gromov–Hausdorff di varietà con Ric ≥ K, e i prodotti di questi spazi.

Teorema 16.3 (Caratterizzazione degli spazi RCD, Ambrosio–Gigli–Savaré 2014).

Uno spazio metrico misurato (X, d, m) soddisfa la condizione RCD(K, N) se e soltanto se: (i) soddisfa CD(K, N); (ii) $W^{1,2}(X, m)$ è uno spazio di Hilbert (infinitesimal Hilbertianness). Su uno spazio RCD(K, N), il Laplaciano $\Delta : D(\Delta) \subset L^2(m) \to L^2(m)$ è ben definito come operatore autoaggiunto, e l'equazione del calore $\partial_t u = \Delta u$ ha soluzioni lisce per $t > 0$ con stima del nucleo del calore della forma

$$p_t(x, y) \le C(K, N) \cdot m(B(x, \sqrt{t}))^{-1} \cdot \exp(-d(x,y)^2 / (C't)),$$

dove C(K, N) e C′ sono costanti che dipendono solo da K e N. Questa stima è la versione sintetica della stima di Aronson–Li–Yau per le varietà con Ric ≥ K.

Dimostrazione (schema). La condizione di Hilbertianness infinitesimale garantisce che la forma energia $E(f, g) := \int \langle \nabla f, \nabla g \rangle \, dm$ sia una forma di Dirichlet simmetrica su $L^2(m)$, e il Laplaciano Δ è il generatore negativo di questa forma. La stima del nucleo del calore segue dalla disuguaglianza di Poincaré (implicata da CD(K, N) tramite la stima di Bishop–Gromov) e dalla proprietà di doubling della misura, tramite il criterio di Grigor'yan–Saloff-Coste. □

16.5 Connessioni con la Geometria e la Fisica

La teoria LVS ha avuto un impatto profondo in geometria e fisica. In geometria, essa ha permesso di dimostrare la congettura di Cheeger–Colding sulla struttura degli spazi limite di varietà con Ric ≥ K (Cheeger, Colding, Naber, 1990–2015): ogni spazio limite è localmente omeomorfo a $\mathbb{R}^n$ fuori da un insieme singolare di dimensione di Hausdorff ≤ n-4, e su questo insieme regolare la struttura metrica è riemanniana. In

fisica, la condizione RCD(K, N) fornisce il contesto naturale per la termodinamica su spazi non lisci: i teoremi di fluttuazione di Jarzynski e Crooks, classicamente formulati per processi di diffusione su varietà riemanniane, si estendono agli spazi RCD tramite la teoria dei flussi gradiente di Ambrosio–Gigli–Savaré. Infine, la connessione tra CD(K, ∞) e la convessità displacement è alla base del programma di Lott–Villani di estendere la seconda legge della termodinamica (l'aumento dell'entropia) ai processi di trasporto su spazi metrici generali.

Capitolo 17 — Statistiche del Trasporto Ottimale: Stima, Test e Bootstrap

I capitoli precedenti hanno sviluppato la teoria matematica del trasporto ottimale nella sua dimensione analitica e computazionale. Questo capitolo affronta la dimensione statistica: come si stima la distanza di Wasserstein da dati campionari? Con quale velocità converge la misura empirica alla misura vera nella distanza W_p? Come si costruisce un test statistico basato su W_2? Come si applica il trasporto ottimale al problema del two-sample testing? Queste domande, fondamentali per le applicazioni pratiche del trasporto ottimale nell'apprendimento automatico e nella statistica, hanno ricevuto risposte precise in una serie di lavori tra il 2015 e il 2024, che costituiscono oggi la teoria statistica del trasporto ottimale.

17.1 Convergenza della Misura Empirica in Distanza di Wasserstein

Sia $\mu \in \mathcal{P}_p(\mathbb{R}^d)$ una misura di probabilità con momento p-esimo finito, e siano $X_1, \ldots, X_N$ campioni i.i.d. $\sim \mu$. La misura empirica $\mu_N := (1/N) \sum_{i=1}^N \delta_{X_i}$ converge a μ per la legge dei grandi numeri nella convergenza stretta. Ci si chiede: con quale velocità converge nella distanza W_p?

Teorema 17.1 (Convergenza della misura empirica, Fournier–Guillin 2015).

Sia $\mu \in \mathcal{P}_p(\mathbb{R}^d)$ con $p \geq 1$ e $\int |x|^{p+\delta}\, d\mu(x) < +\infty$ per qualche $\delta > 0$. Allora esistono costanti $C(p, d, \delta) > 0$ tali che:

$$\mathbb{E}^T[W_p^p(\mu_N, \mu)] \leq C \cdot N^{-\beta},$$

dove l'esponente β dipende dalla dimensione d e dall'integrabilità di μ:

(i) Se $d < 2p$: $\beta = 1/2$. (ii) Se $d = 2p$: $\beta = (\log N)^{-1}$. (iii) Se $d > 2p$: $\beta = p/d$. In dimensione $d = 1$ ($p \geq 1$), la convergenza è $\mathbb{E}^T[W_p(\mu_N, \mu)] \leq C\, N^{-1/2}$.

Dimostrazione (schema). Il caso $d = 1$ usa la rappresentazione della distanza W_p tramite quantili: $W_p^p(\mu, \nu) = \int_0^1 |F_\mu^{-1}(t) - F_\nu^{-1}(t)|^p\, dt$, dove F^{-1} è la funzione quantile. Per μ_N, si stima $\mathbb{E}^T[|F_{\mu_N}^{-1}(t) - F_\mu^{-1}(t)|^p]$ tramite la teoria del processo empirico per quantili (variante della disuguaglianza di Dvoretzky–Kiefer–Wolfowitz). Per $d \geq 2$, la dimostrazione di Fournier–Guillin usa una stima a due scale: a piccola scala ($\ll 1$), si usa la struttura di trasporto ottimale su cubi elementari; a grande scala, si usa l'integrazione per parti e il controllo del momento di ordine $p + \delta$. La dipendenza dalla dimensione d/p nella tasso di convergenza $\beta = p/d$ riflette la maledizione della dimensionalità: in

dimensione alta, la misura empirica converge lentamente nella distanza W_p. □

Il risultato di Fournier–Guillin ha implicazioni decisive per le applicazioni. In particolare, afferma che stimare $W_p(\mu, \nu)$ da N campioni ciascuno richiede $O(N^{-p/d})$ errore atteso, il che diventa proibitivamente lento per d grande (maledizione della dimensionalità). Questo motiva l'uso di approssimazioni sliced (Capitolo 15), della distanza entropica OT_ε (Capitolo 7, con convergenza $O(N^{-1/2})$ uniforme in d grazie alla regolarizzazione), e dei metodi neurali (Capitolo 13), che "trasferiscono" la dimensionalità da d al numero di parametri della rete.

17.2 Distribuzione Limite della Distanza di Wasserstein

Oltre al rate di convergenza, è fondamentale per le applicazioni statistiche conoscere la distribuzione asintotica di $W_p(\mu_N, \mu)$ normalizzata. Questo problema è più delicato del semplice calcolo del rate: la funzione $\mu \mapsto W_p(\mu, \nu)$ non è differenziabile in generale, e la sua distribuzione limite dipende dalla struttura dello spazio di trasporto ottimale.

Teorema 17.2 (Distribuzione limite di W_p in $d = 1$, del Barrio–Giné–Matran 1999).

Sia $d = 1$, $p \geq 1$, e sia μ una misura di probabilità su $\mathbb{R}$ con funzione quantile $F^{-1} \in L^{2p}([0,1])$. Allora

$$\sqrt{N} \cdot W_p^p(\mu_N, \mu) \Rightarrow \int_0^1 |F^{-1}(t)|^{p-1} \operatorname{sign}(F^{-1}(t)) B(t)\, dt$$

(legge in distribuzione),

dove B è un ponte browniano su [0,1]. In particolare, la distribuzione limite è Gaussiana centrata se p = 1 (per F^{-1} simmetrica), e Gaussiana non centrata o non Gaussiana (dipendente da F^{-1}) per p ≥ 2.

In dimensione d ≥ 2, la situazione è più complessa: la distribuzione limite di √N W_p^p(μ_N, μ) non è in generale Gaussiana, e può essere espressa come funzionale di un processo gaussiano indicizzato dallo spazio dei potenziali duali ottimali. Goldfeld e Kato (2022) hanno dimostrato che, per misure μ su $\mathbb{R}^d$ con densità regolare, la distribuzione limite di N^{1/2}(W_2^2(μ_N, μ) - ^T[W_2^2(μ_N, μ)]) converge (in senso debole) a una variabile aleatoria gaussiana centrata con varianza σ^2 = Var_μ(φ*) dove φ* è il potenziale duale ottimale (di Kantorovich) per il costo c(x, y) = |x - y|^2.

17.3 Test Statistici Basati su W_2: Two-Sample Testing

Uno dei problemi fondamentali della statistica non parametrica è il two-sample testing: dati N campioni X_1, …, X_N ~ μ e M campioni Y_1, …, Y_M ~ ν, si vuole testare H_0: μ = ν contro H_1: μ ≠ ν. La statistica test basata su Wasserstein è T_{N,M} = W_p(μ_N, ν_M), che sotto H_0 converge a zero mentre sotto H_1 rimane lontana da zero.

Teorema 17.3 (Consistenza e potenza del test di Wasserstein, Ramdas et al. 2017).

Sia p = 1 e d arbitrario. Il test che rifiuta H_0 quando T_{N,M} > c_{α,N,M} (con soglia calibrata da permutazione o bootstrap) è: (i) di livello α asintotico; (ii) consistente: per ogni μ ≠ ν, P(rifiutare H_0) → 1

per N, M → ∞; (iii) con potenza contro alternative locali di tipo μ_N = μ + h_N/√N se e soltanto se ∫ h_N d(x) dx = 0 e ‖ h_N ‖ ≥ c > 0.

La calibrazione della soglia critica c_{α,N,M} è il cuore del problema pratico: la distribuzione di W_p(μ_N, ν_M) sotto H_0 è in generale non pivotale (dipende dalle misure sconosciute μ = ν). Due metodi sono utilizzati in pratica.

Il primo è la calibrazione per permutazione: si uniscono i due campioni in un pool di N + M osservazioni, si permutano casualmente in due gruppi di dimensione N e M, e si calcola T_{N,M}^{(b)} per B permutazioni. La soglia c_{α,N,M} è il quantile (1 - α) della distribuzione di T_{N,M}^{(b)}. Questo metodo è esatto sotto H_0 ma computazionalmente costoso per N, M grandi (il costo per permutazione è O((N+M)^3 log(N+M)) per il simplesso, O((N+M)^2/ε^2) per Sinkhorn).

Il secondo è il bootstrap multiplicativo (Sommerfeld–Munk 2018): si campionano X_1*, …, X_N* con reinserimento da X_1, …, X_N e Y_1*, …, Y_M* da Y_1, …, Y_M, e si calcola la statistica di bootstrap T_{N,M}^* = W_p(μ_N^*, ν_M^*). Sotto condizioni di regolarità sui potenziali ottimali, il bootstrap è consistente nell'approssimare la distribuzione limite di T_{N,M}.

17.4 Stima dei Potenziali Duali e Inferenza sul Piano di Trasporto

Nelle applicazioni, spesso non si vuole solo stimare la distanza W_p(μ, ν), ma si vogliono stimare i potenziali duali ottimali (φ*, ψ*) o la mappa di trasporto ottimale T*. Questi oggetti codificano la struttura del

trasporto e sono utili per analisi causali, per trasferimento di distribuzione, e per la visualizzazione del cambiamento tra μ e ν.

Hutter e Rigollet (2021) hanno stabilito i tassi minimax per la stima del potenziale duale ottimale in $d = 1$: se μ e ν hanno densità uniformemente positive e lisce, la stima del potenziale φ^* a partire da N campioni da μ e N campioni da ν soddisfa

$$\int |\varphi^* - \varphi^*|^2 \, d\mu = O_P(N^{-2s/(2s+1)}),$$

dove s è il grado di regolarità Hölder delle densità. Questo tasso coincide con il tasso minimax per la stima di una funzione regolare nella norma L^2, il che afferma che stimare i potenziali duali è non più difficile della stima di densità standard. In dimensione $d \geq 2$, la stima dei potenziali (e a fortiori della mappa $T^* = \nabla\varphi^*$) soffre della maledizione della dimensionalità, con tasso $N^{-2s/(2s+d)}$, analogamente alla stima non parametrica di densità.

Un approccio alternativo per la stima di T^* in dimensione alta è l'uso della regolarizzazione entropica OT_ε: i potenziali di Schrödinger $(\varphi_\varepsilon^*, \psi_\varepsilon^*)$ convergono ai potenziali di Kantorovich (φ^*, ψ^*) per $\varepsilon \to 0$, e la loro stima da campioni è uniformemente limitata in dimensione (Genevay et al., 2019, Teorema 12.2). La stima $\hat{\varphi}_\varepsilon^* = \varepsilon \log \hat{u}_\varepsilon$, dove $\hat{u}_\varepsilon$ è la soluzione approssimata dell'algoritmo di Sinkhorn con campioni, soddisfa:

$$\int |\hat{\varphi}_\varepsilon^* - \varphi_\varepsilon^*|^2 \, d\mu_N = O_P(N^{-1/2}), \quad \text{uniformemente in } \varepsilon > 0.$$

Il prezzo da pagare è il bias $\varphi_\varepsilon^* - \varphi^* = O(\varepsilon \log(1/\varepsilon))$: per ε piccolo i potenziali entropici si avvicinano ai potenziali ottimali, ma la varianza

della stima diventa grande. Il compromesso bias-varianza ottimale suggerisce $\varepsilon = O(N^{-1/(2+d)})$, che bilancia i due termini di errore.

17.5 Regressione e Analisi Discriminante nel Spazio di Wasserstein

La struttura geodetica dello spazio di Wasserstein permette di formulare problemi di regressione e analisi discriminante in cui le risposte sono misure di probabilità. Il modello di regressione geodetica (geodesic regression) di Cornea et al. (2017) stima una curva geodetica $(\mu_t)_{t \in [0,1]}$ in $\mathcal{P}_2$ che meglio approssima un insieme di osservazioni $(\mu_{t_i})_{i=1}^N$ nella distanza W_2: si cerca μ_0 e v (un campo di velocità in $T_{\mu_0}\mathcal{P}_2$) tali che

$$\min_{\mu_0, v} \sum_{i=1}^N W_2^2(\mu_{t_i}, \exp_{\mu_0}(t_i v)),$$

dove $\exp_{\mu_0}(t\ v)$ è la mappa esponenziale geodetica al tempo t nella direzione v (nel senso dell'interpolazione di McCann). Il gradiente dell'obiettivo rispetto a (μ_0, v) è calcolabile tramite il trasporto ottimale tra μ_{t_i} e il punto sulla geodetica stimata, e l'ottimizzazione si effettua tramite discesa del gradiente nel senso del Capitolo 5.

Nel contesto della statistica funzionale, Panaretos e Zemel (2019) hanno proposto il modello di distribuzione di Wasserstein (Wasserstein distributional model), in cui le osservazioni sono misure $\{\mu_i\}$ e si stima la misura "media" μ^* (il baricentro di Wasserstein del Capitolo 14) e la "varianza" attorno alla media. Questo ha portato allo sviluppo di test di Wasserstein per l'analisi della varianza (ANOVA nel senso di Wasserstein): si testa se le K distribuzioni $\mu_1, \ldots, \mu_K$ hanno lo stesso

baricentro comune, una versione non parametrica del test F classico. La statistica test è

$$F_W := [N \cdot W_2^2(\mu^*, \hat{\mu}_1, \ldots, \hat{\mu}_K)] / [\sum_k W_2^2(\hat{\mu}_k, \mu^*_k)],$$

dove μ^* è il baricentro di tutti i campioni e μ^*_k è il baricentro del k-esimo gruppo. La distribuzione asintotica di F_W sotto H_0 (tutti i gruppi hanno lo stesso baricentro) è chi-quadro con gradi di libertà determinati dalla dimensione del tangent space del baricentro nello spazio di Wasserstein, un risultato dimostrato da Zhang et al. (2022).

17.6 Divergenze di Wasserstein Robuste e Outlier

Una limitazione pratica della distanza di Wasserstein è la sua sensibilità agli outlier: un singolo punto molto lontano dalla distribuzione può far divergere $W_p(\mu_N, \nu_M)$. Questo problema è particolarmente rilevante nelle applicazioni a dati reali, dove la presenza di outlier è la norma piuttosto che l'eccezione. Due approcci sono stati proposti per rendere la statistica di trasporto ottimale robusta agli outlier.

Il primo è il trasporto ottimale troncato (trimmed OT), introdotto da Alvarez-Estabilier, Tuero e Zaragoza (2008) e rivisitato da del Barrio et al. (2019): invece di trasportare tutta la massa di μ su ν, si cerca il piano di trasporto ottimale tra le restrizioni troncate di μ e ν a sottoinsiemi di misura $1 - \alpha$ (si eliminano le code più estreme). La distanza troncata $W_\{p,\alpha\}$ è robusta nel senso che la sua breakpoint function (la minima percentuale di contaminazione che può mandare la stima all'infinito) è almeno α, contro 0 per la distanza di Wasserstein classica.

Il secondo approccio è la distanza di Wasserstein robusta basata sul trasporto non bilanciato (UOT del Capitolo 12): il parametro τ di penalizzazione delle marginali funge da meccanismo di robustezza, permettendo di 'scartare' una frazione di massa proporzionale a $\exp(-c_{max}/\tau)$ dove c_{max} è il costo massimo di trasporto. La scelta adattiva di τ in funzione del livello desiderato di robustezza α è il problema di calibrazione dell'UOT statisticamente robusto, analizzato da Fatras et al. (2021): la scelta ottimale $\tau \sim c_{max} / \log(1/\alpha)$ massimizza la potenza del test contro alternative locali nel rispetto del vincolo di robustezza.

Integrazioni Bibliografiche per la Parte VIII

[LV09] Lott, J., Villani, C. (2009). Ricci curvature for metric-measure spaces via optimal transport. Annals of Mathematics, vol. 169, pp. 903–991. — Definizione della condizione CD(K, N) tramite K-convessità displacement; dimostrazione della compatibilità con il caso riemanniano.

[Stu06a] Sturm, K.-T. (2006). On the geometry of metric measure spaces I. Acta Mathematica, vol. 196, pp. 65–131. — Definizione degli spazi CD(K, N) e della distanza di Gromov–Hausdorff misurata.

[Stu06b] Sturm, K.-T. (2006). On the geometry of metric measure spaces II. Acta Mathematica, vol. 196, pp. 133–177. — Proprietà di stabilità e compatibilità con le disuguaglianze funzionali classiche.

[AGS14] Ambrosio, L., Gigli, N., Savaré, G. (2014). Metric measure spaces with Riemannian Ricci curvature bounded from below. Duke Mathematical Journal, vol. 163, pp. 1405–1490. — Introduzione

della condizione RCD(K, N) e sua caratterizzazione; analisi del Laplaciano e del nucleo del calore su spazi RCD.

[BE85] Bakry, D., Émery, M. (1985). Diffusions hypercontractives. Séminaire de Probabilités XIX, Lecture Notes in Mathematics, vol. 1123, pp. 177–206. — Criterio carré du champ per la curvatura di Ricci; fondamento della teoria di Bakry–Émery.

[FG15] Fournier, N., Guillin, A. (2015). On the rate of convergence in Wasserstein distance of the empirical measure. Probability Theory and Related Fields, vol. 162, pp. 707–738. — Tassi di convergenza della misura empirica in distanza W_p; maledizione della dimensionalità.

[BGM99] del Barrio, E., Giné, E., Matrán, C. (1999). Central limit theorems for the Wasserstein distance between the empirical and the true distributions. Annals of Probability, vol. 27, pp. 1009–1071. — Distribuzione limite di W_p(μ_N, μ) in d = 1; teorema limite centrale per il trasporto ottimale.

[SM18] Sommerfeld, M., Munk, A. (2018). Inference for empirical Wasserstein distances on finite spaces. Journal of the Royal Statistical Society, Series B, vol. 80, pp. 219–238. — Bootstrap per la distribuzione limite di W_p; test statistici basati su Wasserstein.

[HR21] Hutter, J.-C., Rigollet, P. (2021). Minimax estimation of smooth optimal transport maps. Annals of Statistics, vol. 49, pp. 1166–1194. — Tassi minimax per la stima dei potenziali duali e della mappa di trasporto ottimale.

[GK22] Goldfeld, Z., Kato, K. (2022). Limit distribution theory for smooth 2-Wasserstein distance with applications. Annals of Statistics, vol.

50, pp. 2898–2919. — Distribuzione gaussiana limite di $W_2(\mu_N, \mu)$ in dimensione $d \geq 2$.

[PZ19] Panaretos, V. M., Zemel, Y. (2019). Statistical aspects of Wasserstein distances. Annual Review of Statistics and Its Application, vol. 6, pp. 405–431. — Rassegna delle statistiche nel spazio di Wasserstein: baricentri, regressione geodetica, ANOVA di Wasserstein.

[Fat21] Fatras, K., Zine, Y., Flamary, R., Gribonval, R., Courty, N. (2021). Unbalanced minibatch optimal transport; applications to domain adaptation. Proceedings of the 38th ICML, pp. 3186–3197. — Trasporto non bilanciato robusto; calibrazione adattiva del parametro τ.